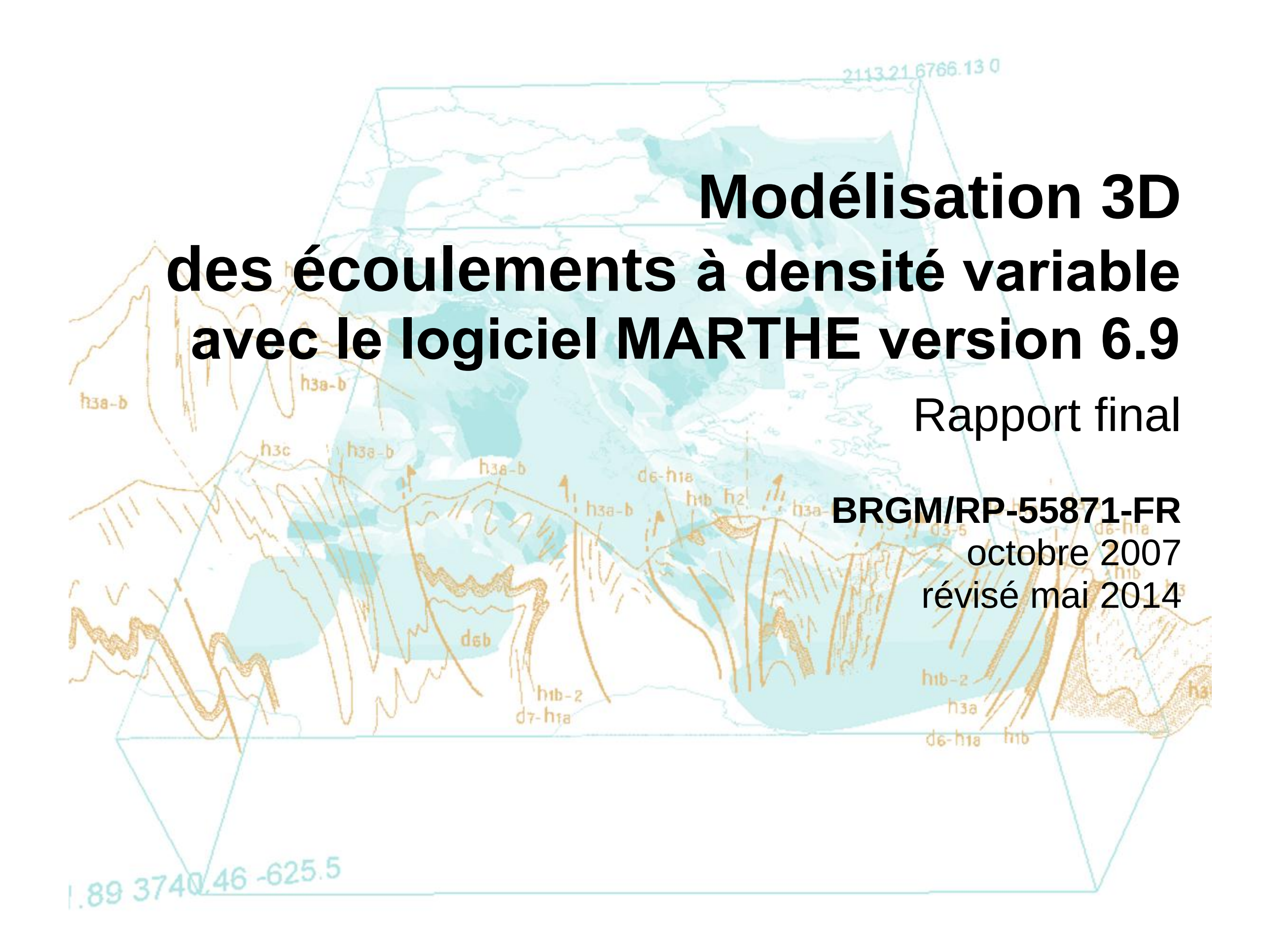


Document public



Modélisation 3D des écoulements à densité variable avec le logiciel MARTHE version 6.9

Rapport final

BRGM/RP-55871-FR
octobre 2007
révisé mai 2014





Modélisation 3D des écoulements à densité variable avec le logiciel MARTHE version 6.9

Rapport final

BRGM/RP-55871-FR
octobre 2007
révisé mai 2014

Étude réalisée dans le cadre des projets
de Recherches du BRGM 07EAU11

D. Thiéry

Vérificateur :	**Approbateur :**
Nom : M.L. NOYER	Nom : D. PENNEQUIN
Date :	Date :
Signature :	Signature **:**

En l'absence de signature, notamment pour les rapports diffusés en version numérique, l'original signé est disponible aux Archives du BRGM.



Mots clés : Modélisation Hydrodynamique, Effets de densité, Eau salée, Biseau salé, Différences finies.

En bibliographie, ce rapport sera cité de la façon suivante :

Thiéry D. (2007) - Modélisation 3D des écoulements à densité variable avec le logiciel MARTHE version 6.9. Rap. BRGM/RP-55871-FR, 88 p., 23 fig.

Synthèse

La prise en compte des variations spatiales et temporelles de la densité du fluide est nécessaire pour modéliser les écoulements dans les aquifères situés à proximité de la mer, dans les aquifères profonds contenant de l'eau salée fossile, ou dans les aquifères pollués par infiltration de saumures. Dans ce but la prise en compte des variations de la densité du fluide a été introduite dans le modèle hydrodynamique MARTHE. La salinité, dont résulte la densité du fluide, peut être imposée (à partir de mesures) ou bien être calculée par le modèle. Les calculs hydrodynamiques, 2D ou 3D, peuvent s'effectuer en régime permanent ou en régime transitoire, en nappe libre ou captive, ou en Zone Non Saturée.

Ce rapport présente le principe des calculs ainsi que le mode d'emploi détaillé de cette fonctionnalité. Un certain nombre d'applications décrites en détail servent d'une part à aider les utilisateurs dans la mise en œuvre de la modélisation, et d'autre part à prouver que le modèle fonctionne bien et peut être utilisé en confiance dans une démarche d'assurance qualité.

Sommaire

Liste des figures

1. Introduction

Les modèles hydrodynamiques classiques d'écoulement en milieu poreux permettent le calcul des écoulements de fluides incompressibles à densité constante. Cependant dans un certain nombre de cas la densité du fluide incompressible peut présenter des variations spatiales ou temporelles. Dans les aquifères profonds ou à proximité de la mer, l'eau contenue dans les aquifères contient parfois du sel qui induit des variations spatiales de sa densité. Les gradients géothermiques ou les stockages de chaleur ou de matières dégageant de la chaleur induisent par ailleurs des variations de température qui provoquent des variations de densité de l'eau.

Le logiciel MARTHE 6.7 permet la prise en compte des variations de la densité du fluide. Il fonctionne en régime permanent ou transitoire et la densité peut être imposée ou calculée par le modèle. Les effets de la densité peuvent être pris en compte : en nappe **libre**, **captive** ou en **zone non saturée**, en écoulement isotherme ou avec effets de **température**. Cette fonctionnalité, dont le principe est décrit par Thiéry (1993b), a été développée et intégrée dans le logiciel MARTHE dans le cadre du plusieurs projets de recherche du BRGM en 1998. Elle complète la fonctionnalité de transport de masse classique de MARTHE 5.4 (Thiéry 1995a) qu'il est indispensable de connaître pour lire avec profit le présent rapport.

La fonctionnalité de transport classique de MARTHE 5.4 concerne le transport de solutions peu concentrées dans lesquelles la masse volumique de la solution est indépendante de sa concentration. C'est l'hypothèse du traceur. Avec la nouvelle version il est possible de faire un calcul de transport de masse classique (polluant peu concentré), et de prendre en compte **en plus** les effets de la densité, dus par exemple à la présence d'un biseau salé.

La réalisation de ce rapport a été financée par le projet HYDROCLIM du BRGM.

2. Notations

Notations			Unité SI	Relation
H	:	charge hydraulique	m	H = z + h / d
x, y	:	distances	m	
z	:	altitude (> 0 vers le haut)	m	
g	:	accélération de la pesanteur	m/s²	
k	:	perméabilité intrinsèque	m²	
µ	:	viscosité dynamique de l'eau	kg/m/s	
ρ	:	masse volumique de l'eau	kg/m^3	
ρ_o	:	masse volumique de l'eau douce	kg/m^3	
p	:	pression	N/m²	
h	:	pression en mètres d'eau douce (hors pression atmosphérique)	m	$h = p / \rho_o g$
K	:	perméabilité à l'eau	m/s	$K = \rho_o g . k/\mu$
V	:	vitesse (de Darcy)	m/s	
Q	:	débit	m^3/s	
T	:	transmissivité	m²/s	T = K . b

b	:	hauteur mouillée	m	
t	:	temps	s	
S_s	:	coefficient d'emmagasinement spécifique	m^{-1}	
S_L	:	coefficient d'emmagasinement libre	m/m	
C	:	salinité (concentration dense)	kg/m^3	
H_d	:	charge équivalente en eau douce	m	$H_d = z + h$
ω	:	porosité cinématique	m^3/m^3	
d	:	densité relative	(-)	$d = \rho / \rho_o$
HH	:	« niveau pseudo piézométrique »	m	$HH = d . H$ $= d . z + h$

Variable	Définition	Extension du fichier
SALINITE	Salinité (ou concentration dense)	salini
SALIN_EXT	Salinité extérieure	salext
SALINIT_SORT	Salinité dans un débit sortant	-
SALIN_RECH	Salinité dans les apports pluviométriques	-
MASS_SALIN	Apport de « masse dense » (Dirac)	msali
QMASS_SALIN	Flux massique (de salinité)	qmas_s
DIFFUS_MOLEC	Diffusion moléculaire	dimol
DISPER_LONGI	Dispersion Longitudinale	alfal
DISPER_TRANSV	Dispersion Transversale	alfat

Par rapport aux variables se rapportant au transfert de masse classique, on a la correspondance suivante :

Variable	Unité	Transport Classique
SALINITE	Unité de salinité	CONCENTR
SALIN_EXT	Unité de salinité	CONCEN_EXT
SALINIT_SORT	Unité de salinité	CONCEN_SORT
SALIN_RECH	Unité de salinité	CONCEN_RECH
MASS_SALIN	Unité de masse	MASS_CONCEN
QMASS_SALIN	Unité de masse / Unité de temps	QMASS_CONC

3. Définition des grandeurs utilisées dans le modèle

3.1. MASSE VOLUMIQUE

C'est la masse de fluide par unité de volume de fluide (kg/m^3). Elle est notée ρ.

3.2. SALINITÉ

Le modèle MARTHE permet le transport de solutés à faibles concentrations selon l'hypothèse du traceur. Dans le modèle ces concentrations sont désignées par la variable CONCENTR, d'extension de fichier [.conce]. Il est possible d'utiliser également une autre concentration, appelée ici « salinité » ou « concentration dense ». C'est la concentration volumique de soluté (sel) responsable de la variation de masse volumique du fluide. Dans le modèle MARTHE la salinité correspond à la variable SALINITE, d'extension de fichier [.salini]. Dans ce rapport on utilisera indifféremment le terme « salinité » ou « concentration dense ».

La salinité est exprimée en kg de soluté par m^3 de fluide mais il est possible de définir dans le modèle une unité utilisateur de salinité. Le modèle MARTHE permet d'avoir simultanément des « concentrations » (CONCENTR), pour un problème de transfert de pollution, et des « salinités » (SALINITE), dues par exemple à la proximité de la mer (autre soluté, autres conditions aux limites).

Par souci de concision - bien que le terme ne soit pas correct - les Entrées / Sorties du modèle utilisent parfois le terme de « densité » au lieu de « salinité ».

- La salinité de l'eau pure est égale à 0.
- La salinité de l'eau de mer est voisine de 35 kg/m^3 de NaCl dans l'Atlantique, et de l'ordre de 10 kg/m^3 dans la mer Baltique.

Il est possible également d'utiliser comme salinité la concentration en un ion au lieu de la concentration en soluté. On pourra par exemple, dans le cas d'une eau salée, utiliser la concentration en Cl^- au lieu de la concentration en NaCl. Il faudra alors en tenir compte pour le calcul de la masse volumique du fluide.

3.3. DENSITÉ RELATIVE

C'est le rapport **d** de la masse volumique **ρ** du fluide à la masse volumique $\boldsymbol{\rho_O}$ de l'eau pure (douce) à une température de référence (15°C environ) : $d = \rho / \rho_O$ (sans dimension).

Compte tenu de la masse atomique du NaCl de 58.45 g et du volume du sel (NaCl) dissout de l'ordre de 16.3 cm^3/mole, on obtient généralement les valeurs suivantes dans l'eau de mer (Atlantique) :

- Salinité = 35 kg/m^3
- Masse volumique de l'eau de mer = 1 025 kg/m^3
- Densité relative = 1.025

En effet considérons un volume de 1 m^3 d'eau pure (de masse 1000 kg). On lui ajoute 35 kg de sel (solide) soit 35000/58.45 moles. Le volume occupé par le sel en solution ajouté est égal à environ 16.3 cm^3/mole d'où un volume total de $(1 + 35000/58.45 \times 16.3\ 10^{-6})\ m^3$, soit 1.0098 m^3. On a donc au total une masse de solution de 1035 kg dans un volume de 1.0098 m^3 d'où une masse volumique égale à 1035/1.0098 = 1025 kg/m^3.

3.4. PRESSION

Dans le modèle, au lieu des pressions **p** (dont l'unité légale est le Pascal Pa = N/m²), on utilise les pressions **h** exprimées en hauteur d'eau douce équivalente, à la température de référence : variable PRESSION, d'extension de fichier [.press]. On utilise donc la relation :

$$h = p / \rho_o . g$$

avec :

h	= Pression en hauteur d'eau douce, hors pression atmosphérique (m)
p	= Pression réelle (Pa)
ρ_o	= Masse volumique de l'eau douce à la température de référence = 1000 kg/m^3
g	= Accélération de la pesanteur = 9.81 m/s² (à Paris)

On a alors la relation numérique (en unités S.I.) :

$$h = 1.019\ 10^{-4} . p$$

Par souci de concision, on utilise dans le modèle le mot « pression » pour désigner « pression en mètres d'eau douce ».

L'unité utilisateur de pression est l'unité utilisateur de charge (qui est aussi celle des altitudes).

3.5. CHARGE D'EAU DOUCE

C'est l'altitude $\mathbf{H_d}$ de l'eau dans la colonne d'eau douce qui équilibre la pression mesurée à l'altitude **z**. (C'est l'altitude de l'eau douce qu'on observerait dans un piézomètre ponctuel crépiné à l'altitude **z** et rempli artificiellement par de l'eau douce) :

$$H_d = h + z$$

avec :

H_d = Charge d'eau douce (m)

h = Pression en mètre d'eau douce (m)

z = Altitude (orientée vers le haut) du point de mesure (m)

L'unité utilisateur de charge d'eau douce est l'unité utilisateur de charge.

Cette charge d'eau douce $\mathbf{H_d}$ est parfois appelée « niveau pseudo-potentiométrique » mais il vaut mieux éviter ce terme. La charge d'eau douce, qui est la pression corrigée de l'altitude, pourra être utilisée dans le modèle au lieu d'utiliser la pression.

3.6. CHARGE RÉELLE (CHARGE D'EAU SALÉE)

Soit un point situé à l'altitude **z** ayant une pression **h** et une masse volumique **ρ**.

La charge réelle **H** est l'altitude de la colonne de fluide dense, de masse volumique **ρ**, qui équilibre la pression **h** :

$$H = z + p / \rho.g$$

soit :

$$H = z + h . \rho_0 / \rho$$

C'est l'altitude de l'eau qu'on observerait dans un piézomètre ponctuel crépiné à l'altitude **z** qui se remplirait naturellement avec l'eau de la nappe à cette altitude.

C'est cette charge qui est utilisée dans le modèle pour vérifier, dans chaque maille si la nappe est dénoyée, ou libre, ou déborde. En effet, si la maille n'est pas saturée d'eau, sa hauteur d'eau (saline) est bien égale à sa charge réelle. Cette charge réelle est parfois appelée « niveau piézométrique ».

Dans le modèle, le terme « **charge** » désigne toujours la **charge réelle** (variable CHARGE).

3.7. SALINITÉ EXTÉRIEURE

C'est la salinité (kg/m^3) d'un éventuel fluide entrant dans l'aquifère soit par injection artificielle, soit par des limites à potentiel imposé : variable SALIN_EXT d'extension de fichier [.salext]. Il est ainsi possible de simuler une injection d'un fluide plus dense que l'eau pure (eau salée) ou moins dense (eau chaude par exemple).

3.8. SALINITÉ DE LA RECHARGE

C'est la salinité (kg/m^3) de la recharge de l'aquifère (variable SALIN_RECH). Dans le modèle, elle ne concerne que la recharge par les précipitations. Elle ne s'applique pas aux flux d'excès d'irrigation.

4. Principes des calculs

Les lois de l'hydrodynamique appliquées à un fluide incompressible consistent à écrire 2 lois de conservation :

- conservation du débit de fluide (de densité variable) ;
- conservation de la masse de soluté (équation du transport par Convection Dispersion).

Les calculs sont donc réalisés en 2 étapes successives :

① Dans un premier temps on suppose qu'on connaît en chaque point une première estimation de la salinité, et donc de la masse volumique du fluide et on calcule les charges qui en résultent. À partir des gradients de charge on détermine les vitesses d'écoulement.

② À partir de ces vitesses on résout l'équation de Convection-Dispersion pour obtenir une meilleure estimation des salinités.

Et on itère sur ① et ②.

4.1. CALCUL DES CHARGES HYDRAULIQUES

On suppose qu'à ce stade on connaît en chaque point la masse volumique ρ du fluide, donc sa densité, et on calcule les charges qui en résultent. Le fluide étant considéré comme incompressible on écrit l'équation de conservation des débits.

4.1.1. Équation de conservation des débits

L'équation de conservation des débits s'écrit :

$$\left(\sum_{i=1}^{6} Q_i + Q_{ext} \right) = \text{Volume stocké} / dt \qquad (1)$$

avec : i = une des 6 directions Nord, Sud, Est, Ouest, Haut et Bas

Q_i = débit provenant de la direction i

Q_{ext} = débit extérieur, positif s'il est injecté, négatif s'il est prélevé.

4.1.2. Discrétisation

Le modèle MARTHE est basé sur un schéma à volumes finis, avec des mailles parallélépipédiques, qui se ramène donc à un schéma à différences finies. Dans un tel schéma chaque maille est caractérisée par une valeur des paramètres suivants :

- k, p, ρ, μ constantes dans toute la maille

  k = Perméabilité intrinsèque

  p = Pression du fluide

  ρ = Masse volumique du fluide

  μ = Viscosité (dynamique) du fluide

- x, y, z coordonnées du centre de la maille
- V_N, V_S, V_E, V_W, V_H, V_B : 6 vitesses de Darcy à travers chacune des 6 faces.

Les vitesses de Darcy sont en fait les débits d'échange par unité de surface d'échange

4.1.3. Échanges entre 2 mailles

La vitesse de Darcy **V** dérive du gradient de pression **p**. Elle est donnée par la loi de Darcy qui s'écrit (en omettant les flèches sur les vecteurs) :

$$V = -\frac{k}{\mu}\ \text{Grad}\ p + \rho.g\,\text{Grad}\ z \qquad (2)$$

C'est une expression vectorielle qui s'applique à chacune des 6 directions.

En utilisant la relation $k = K.\mu / \rho_o.g$ qui relie la perméabilité intrinsèque **k** à la perméabilité à l'eau douce **K** (appelée aussi conductivité hydraulique à l'eau douce), la loi de Darcy s'écrit :

$$V = -\frac{K}{\rho_o.g}\ \text{Grad}\ p + \rho.g\ .\ \text{Grad}\ z \qquad (3)$$

En faisant intervenir la pression **h** en hauteur d'eau douce (et la densité relative **d**) on obtient :

$$V = -K\ .\ [\text{Grad}\ h + d\ .\ \text{Grad}\ z] \qquad (4)$$

Soient 2 mailles adjacentes : la maille de calcul (indice **c**) et la maille voisine (indice **v**). La vitesse de Darcy V_v et le débit Q_{vc} échangé de la maille **v** vers la maille **c** s'écrivent :

$V_V = - K_{VC} . [(h_V - h_C) + d_{VC} . (z_V - z_C)] / dx_{VC}$ (5)

$Q_{VC} = T_{VC} . [h_V - h_C + d_{VC} . (z_V - z_C)]$ (6)

avec :

K_{VC} = Perméabilité d'échange entre les 2 mailles.

T_{VC} = Coefficient d'échange entre les 2 mailles.

d_{VC} = Densité relative moyenne entre des mailles

dx_C = Largeur de la maille centrale

dx_V = Largeur de la maille voisine

dx_{VC} = Distance entre les centres des mailles = $(dx_V + dx_C) / 2$.

Coefficient d'échange pour le calcul du débit échangé entre 2 mailles

Plusieurs choix de pondération sont possibles pour le calcul du coefficient d'échange T_{vc} entre les 2 mailles : une pondération harmonique, une pondération géométrique ou une pondération amont. Par exemple : soit une maille voisine située à l'ouest de la maille de calcul. En choisissant une pondération *harmonique* et en prenant en compte les épaisseurs mouillées dz_v et dz_c dans chacune des mailles, et la largeur dy_c commune aux 2 mailles, on obtient la transmissivité équivalente T_{equiv} entre les 2 mailles par la relation classique :

$$\frac{dx_v}{K_v \, . \, dz_v} + \frac{dx_c}{K_c \, . \, dz_c} = \frac{dx_v + dx_c}{T_{equiv}} = \frac{2 \, dx_{vc}}{T_{equiv}}$$

Le coefficient d'échange $T_{VC} = T_{equiv} . dy_C / dx_{VC}$ est alors donné par :

$T_{VC} = 2 . dy_C . (K_C.K_V.dz_C.dz_V) / (K_C.dx_V.dz_C + K_V.dx_C.dz_V)$ (7)

Densité moyenne pour le calcul du débit échangé entre 2 mailles

On peut montrer facilement que, pour respecter un équilibre hydrostatique sur la verticale, la densité relative d_{vc} à prendre en compte pour les échanges est la moyenne arithmétique pondérée des 2 densités voisines d_v et d_c :

$d_{VC} = (d_V . dx_V + d_C . dx_C) / (dx_V + dx_C)$.

4.1.4. Terme de stockage

Il faut donc relier la variation de volume stocké à la variation de pression **h**. Soit **Vol** le volume d'eau dans une maille et **Surf** l'aire horizontale de la maille.

En nappe captive on a :

$$\frac{d(\mathrm{Vol})}{\mathrm{Vol}} = S_S \,.\, dh$$

avec : S_S = Coefficient d'emmagasinement spécifique (m^{-1})

dh = Variation de pression au cours du temps.

En nappe libre, on a :

$$\frac{d(\mathrm{Vol})}{\mathrm{Surf}} = S_L \,.\, dH$$

avec : H = Hauteur d'eau réelle dans la maille (charge réelle) (m)

S_L = Coefficient d'emmagasinement en nappe libre (-)

Si l'état de la nappe change au cours du pas de temps, on a une relation mixte qui dépend de $\mathbf{S_S}$, $\mathbf{S_L}$, **H**, **h** et de la cote du toit de la nappe.

4.1.5. Mise en équation

En utilisant l'expression (6), l'équation (1) de conservation des débits s'écrit :

$$\sum_{i}^{6} T_i \cdot (h_i - h_c) + Q_{ext} + \sum_{1}^{6} T_i . d_i . (z_i - z_c) = d(\mathrm{Vol}) / dt \quad (8)$$

avec : d (Vol) / dt = dx . dy . dz . S_S . (h_c - h_p) / dt, en nappe captive

dx, dy, dz = Dimensions de la maille

h_p = Pression au début du pas de temps

dt = Durée du pas de temps

i = Indice de la valeur pondérée dans la direction **i**.

On obtient ainsi l'équation :

$$\underbrace{\sum_i A_i.h_i - A_c.h_c \;=\; -B - E}_{\text{équation classique en pression}} \quad \underbrace{-F}_{\text{terme complémentaire}} \qquad (9)$$

avec : $F = \sum T_i.d_i.(z_i - z_c)$ et $E = S . dx . dy . h_p / dt$

A_i, A_c et B étant des constantes

avec : S	=	$S_S . dz$	si la nappe reste captive pendant le pas de temps **dt**
	=	S_L / d_p	si la nappe reste libre
	=	$f(S_S, S_L, dz, d_p)$	si la nappe change d'état pendant **dt**

4.1.6. Initialisation des Charges et Pressions

Avant calcul on définit dans le modèle :

- les salinités initiales ;
- les charges initiales ;
- les pressions initiales.

La salinité définit la densité du fluide. Après avoir défini cette densité, il est redondant de fixer des valeurs initiales de charges **et** de pressions qui ne sont pas forcément cohérentes.

Un paramètre du modèle permet donc de décider si les valeurs initiales à retenir sont les charges initiales **ou** les pressions initiale. La deuxième variable (pression si on a retenu la charge, ou charge si on a retenu la pression) est alors calculée par :

$H = z + h / d$ ou $h = (H - z) . d$

Les charges et les pressions sont alors au pair (compte tenu de la densité).

Quel que soit le mode de résolution, le potentiel correspondant (charge, pression) est imposé dans les mailles à potentiel imposé et les résultats obtenus ne dépendent pas de ce choix. Il est conseillé, à chaque fois que c'est possible de choisir une initialisation en charge, plutôt qu'en pression.

4.1.7. Résolution du système d'équations

a) Résolution en pression

Ce système d'équations, écrit en pression, se résout facilement par la méthode des gradients conjugués. Ce système est cependant mal conditionné. En conséquence sa résolution peut poser quelques problèmes numériques, surtout dans une implémentation en simple précision. En effet dans un schéma d'écoulement classique la charge est souvent quasi constante sur la verticale. La pression en revanche croît linéairement avec la profondeur. Par exemple si on a une variation de 1 m de charge sur 1 000 mètres d'épaisseur d'aquifère - ce qui est réaliste - une erreur relative de 10^{-4} sur la pression du fond, soit une erreur 10^{-1} mètre, induit une erreur de charge de 10^{-1} mètre qui est égale à 10 % de la différence de charge. Une telle erreur n'est pas acceptable. Il vaut mieux alors réaliser les calculs en charges réelles ou en charges d'eau douce.

b) Résolution en charges (réelles)

Étant donné que le modèle MARTHE est un modèle général qui permet de simuler une nappe libre éventuellement localement dénoyée, il faut être en mesure de connaître le niveau réel de l'eau dans chaque maille.

Dans chaque maille la charge (réelle) **H** est donnée par :

$$H = z + p \ / \ \rho.g \qquad (10)$$

c'est la hauteur du fluide de densité $\boldsymbol{\rho}$ (et non $\boldsymbol{\rho_O}$) dans la maille.

On a donc :

$$H = z + h \ . \ \rho_o / \rho$$

c'est à dire :

$$H = z + h/d \qquad (11)$$

L'équation (6) donnant le débit échangé entre 2 mailles s'écrit :

$$Q_{vc} = T_{vc} \cdot \left[h_v - h_c + d_{vc} \cdot (z_v - z_c) \right]$$

On en déduit en remplaçant $\mathbf{h_V}$ et $\mathbf{h_C}$ par leur expression en fonction de **H** :

$$Q_{vc} = T_{vc} \cdot \left[(d_v.H_v - d_v.z_v) - (d_c.H_c - d_c.z_c) + d_{vc} \cdot (z_v - z_c) \right]$$

$$Q_{vc} = T_{vc} \cdot \left[d_v.H_v - d_c.H_c + d_c \cdot z_c - d_v \cdot z_v \ \ + d_{vc} \cdot (z_v - z_c) \right]$$

On définit alors la nouvelle variable **HH** (qui est parfois appelée « niveau pseudo-piézométrique ») :

HH = d . H (c'est-à-dire, en fait : h + d . z) (12)

et on obtient :

$$Q_{vc} = T_{vc} \cdot \left[HH_v - HH_c + f_{vc} \right] \qquad (13)$$

avec :

$$f_{vc} = \left[d_c \cdot z_c - d_v \cdot z_v + d_{vc} \cdot \left(z_v - z_c \right) \right] \qquad (14)$$

La variable **HH** a bien la « dimension » d'une charge. Comme toute « charge » elle dépend généralement peu de **z** dans les schémas d'écoulement classiques.

L'équation de conservation du débit s'écrit alors :

$$\sum_i T_i \; . \; HH_i - \left(\sum T_i \right) . \; HH_c = - Q_{ext} - \sum_i T_i . f_i - E \qquad (15)$$

soit :

$$\sum_i A_i . \; HH_i \; - \; A_c . \; HH_c \; = \; - \; B \quad - \; F \quad - \; E$$

qui se résout immédiatement et exactement par la méthode des gradients conjugués. On obtient alors **HH**, d'où le modèle déduit la charge **H** :

H = HH / d (d étant connue)

H permet alors de tester l'état de saturation ou de dénoiement dans chaque maille. La seule légère difficulté pratique survient si la densité **d** n'est pas connue mais doit être calculée par le logiciel. En effet les conditions aux limites de l'équation (15) conduisent à imposer **d . H** et non **H**. Il faut donc réactualiser **d . H** à chaque nouvelle estimation de **d**.

c) Résolution en charges d'eau douce

La charge d'eau douce $\mathbf{H_d}$ est définie par :

$H_d = h + z$

L'équation (6) donnant le débit échangé entre 2 mailles, écrite en $\mathbf{H_d}$, devient :

$Q_{vc} = T_{vc} \, [(H_{dv} - z_v) - (H_{dc} - z_c) + d_{vc} \, (z_v - z_c)]$

$Q_{vc} = T_{vc} \, [H_{dv} - H_{dc} + f_{vc}]$ (16)

avec :

$f_{vc} = (d_{vc} - 1) . (z_v - z_c)$ (17)

L'équation de conservation du débit s'écrit alors :

$$\sum_i T_i.H_{d_i} - \left(\sum T_i\right).H_{d_c} = -Q_{ext} - \sum_i T_i.f_i - E \qquad (18)$$

soit :

$$\sum_i T_i.H_{d_i} - A_c . H_{d_c} = -B - F - E$$

Le système d'équations se résout immédiatement par la méthode des gradients conjugués. La résolution est identique à la résolution en pression, mais chaque équation est centrée par rapport à **z**. Le système est donc beaucoup mieux conditionné. Les conditions aux limites se déduisent immédiatement des conditions aux limites en pression. Il suffit d'ajouter l'altitude aux pressions imposées pour obtenir les charges d'eau douce imposées.

Après résolution, on obtient le champ de charges d'eau douces $\mathbf{H_d}$, que le modèle transforme en charges réelles **H** par :

$H = H_d / d + z . (1 - 1 / d)$

Le modèle utilise alors ces charges **H** pour vérifier les dénoyages et les débordements.

C'est ce schéma de résolution qui est conseillé. Il peut toujours être utilisé, sauf dans le cas d'un système présentant en certaines mailles la condition limite suivante :

Charge réelle imposée mais salinité non imposée.

d) Choix du mode de résolution

Quel que soit le mode de résolution choisi, les résultats sont du même ordre mais les résultats obtenus par un calcul en charge, ou en charge d'eau douce, sont plus précis. En particulier, les bilans de débits échangés sont améliorés. Il y a cependant quelques différences d'interprétation.

- **Potentiels imposés**

Selon le mode de résolution, le « potentiel » correspondant (charge, charge d'eau douce, pression) est imposé dans les mailles à potentiel imposé. Nous employons ici le terme de « potentiel » pour désigner la charge, la charge d'eau douce ou la pression, bien qu'il ne s'agisse pas à proprement parler d'un **potentiel** d'où dériveraient les vitesses. En fait les mailles à « potentiel imposé » désignent les mailles dans lesquelles une charge ou une pression est imposée.

- **Zone équipotentielles**

Si on définit des zones équipotentielles, la résolution impose un **potentiel** constant (non spécifié) dans chacune de ces zones.
Si les calculs sont réalisés en **charge réelle**, la charge, donc le niveau de l'eau, sera uniforme dans chaque zone (par exemple, le niveau de l'eau dans un drain, une cavité).

Si la résolution est en **charge d'eau douce**, c'est la charge d'eau douce qui sera uniforme (la pression sera alors uniforme uniquement si la zone équipotentielle est à altitude constante).

Si les calculs sont réalisés en **pression**, la pression sera uniforme dans chaque zone (par exemple, la pression atmosphérique dans une galerie ou une cavité).

4.2. CONSERVATION DE LA MASSE DE SOLUTÉ (TRANSPORT)

4.2.1. Mise en équation

On admet une relation entre la masse volumique **ρ** du fluide, sa concentration (salinité) **C** en un soluté (par exemple du sel NaCl) et sa température TEMPÉR :

$$\rho = f\,(C, \text{TEMPER})$$

ou :

$$d = f\,(C, \text{TEMPER}) / \rho_o$$

Par exemple, à température constante, on pourra choisir :

$$\rho = \rho_o + a \,.\, C$$

Le calcul du champ de masse volumique (ou de densité) est obtenu par l'équation de **conservation de la masse du soluté**. Cette équation de conservation de la masse correspond au transport par Convection et Dispersion de la salinité **C**.

L'équation de conservation de la masse du soluté (équation du transport) s'écrit :

$$\frac{\partial(\omega . C)}{\partial t} = \frac{\partial^2 (D . \omega . C)}{\partial x^2} - \frac{\partial (V . C)}{\partial x} + QM \qquad (19)$$

avec :

D = Coefficient de dispersion (m^2/s)
V = Vitesse de Darcy (m/s)
QM = Flux massique injecté (terme source) ($kg/s/m^3$)
ω = Porosité cinématique (m^3/m^3)

4.2.2. Discrétisation et résolution

C'est un problème de transport absolument analogue au transport de masse classique du modèle MARTHE. Un couplage itératif entre le calcul des charges et le calcul des salinités est cependant nécessaire puisque : la salinité dépend du transport, qui dépend du champ de vitesse, qui dépend de la densité, qui dépend ... de la salinité.

4.3. CONDITIONS AUX LIMITES ET TERMES SOURCES

4.3.1. Équation du transport

Les conditions aux limites sont absolument identiques à celles du transport classique dans le modèle MARTHE (Thiéry, 1995a).

- **Salinité imposée**

On fixe la variable SALINITÉ du modèle à la salinité souhaitée et on indique que cette valeur est imposée en fixant la variable SALIN_EXT à la valeur 9999.

- **Salinité extérieure**

C'est la salinité provenant de l'extérieur (variable SALIN_EXT, d'extension de fichier [.salext]). C'est la salinité du fluide qui rentre dans le modèle. Si le fluide entre (débit > 0), il entre avec cette salinité. S'il le fluide sort (débit < 0), cette salinité n'est pas prise en compte. Cette condition limite correspond, par exemple, à un aquifère bordé par la mer ou par un lac (bien mélangé). La variable SALIN_EXT correspond à la variable CONCEN_EXT (« concentration extérieure ») du transport de masse classique.

- **Salinité de l'infiltration (par les précipitations)**

C'est la salinité dans le flux d'infiltration (ou de recharge) dans les zones où elle est positive. Cette variable, notée SALIN_RECH, correspond à la variable CONCEN_RECH (« concentration dans la pluie ») du transport de masse classique.

- **Flux massique imposé**

Variable QMASS_SALIN, d'extension de fichier [.qmas_s]. Cette variable correspond à la variable QMASS_CONC du transport de masse classique. Le flux massique est exprimé en masse par unité de temps [$M.T^{-1}$]. Dans le code MARTHE il est donné par défaut en *unité utilisateur de masse par unité utilisateur de temps*. Il est cependant possible, par une option dans le paragraphe « unités », de donner ce flux massique en unité de masse par unité de temps et par mètre carré de surface de maille perpendiculaire à la pesanteur.

- **Injection instantanée de masse dense (Dirac)**

C'est un apport instantané de masse dense (sous forme d'un Dirac) : variable MASS_SALIN d'extension de fichier [.msali]. Cette variable correspond à la variable MASS_CONCEN du transport de masse classique. Dans le code MARTHE cette injection de masse est donnée en *unité utilisateur de masse*. Il est cependant possible, par une option dans le paragraphe

« unités », de donner cet apport de masse en unité de masse par mètre carré de surface de maille perpendiculaire à la pesanteur.

4.3.2. Équation hydrodynamique (en charge ou en pression)

Les conditions aux limites sont identiques à celles du calcul des charges classiques.

- **Potentiel imposé**

Selon le type de résolution, il est possible d'imposer :

- la charge, ou
- la pression

Il convient de remarquer que si la densité est imposée dans une maille, il est équivalent d'y imposer une charge ou une pression. Si la densité est calculée et résulte du champ de charges (ou de pression), l'imposition d'une nouvelle charge produit une pression qui dépend de la densité. Réciproquement, l'imposition d'une pression produit une charge (réelle) qui dépend de la densité.

- **Débit nul**

C'est une limite étanche (en débit de fluide) classique

- **Débit imposé**

C'est un terme source classique (pompage ou injection de fluide). Il s'agit bien de débits **volumiques** (m^3/s).

4.4. RÉGIME TRANSITOIRE

Le modèle MARTHE permet de calculer les charges (ou les pressions) en régime permanent ou en régime transitoire. Il permet également de calculer les salinités en régime permanent ou en régime transitoire. Dans le cas général, en régime transitoire, on aura l'Hydrodynamique en transitoire et le Transport en transitoire. Cependant pour les nappes captives on pourra parfois se contenter de calculer l'hydrodynamique en permanent compte tenu des faibles coefficients d'emmagasinement captifs.

4.5. COUPLAGE

4.5.1. Relation entre la salinité et la densité

La densité du fluide est calculée à partir de la salinité **C** suivant une relation linéaire ou non :

$$\rho = f\ (C,T)$$

avec :

C = Salinité = concentration en soluté en kg/m^3 (kg de soluté par m^3 de solution),
ρ = Masse volumique du fluide en kg/m^3,
T = Température locale du fluide.

Parmi les lois classiques, on admet généralement pour l'eau salée (à température **T** constante) :

- une loi linéaire en fonction de la salinité :

$$\rho = 1000 + a \cdot C$$

avec **a** = 0.70 environ, si **C** est exprimé en kg/m^3 de NaCl. Si **C** est exprimé en kg/m^3 d'ion Cl^-, **a** sera égal à environ 1.15. Pour un fluide plus léger que l'eau, **a** peut être négatif ;

- on peut aussi utiliser la relation Schlumberger (décrite par Vandenbeusch, 1976 révisée) valable jusqu'à une concentration en NaCl de plus de 250 kg/m^3 :

$$\rho = 1000 \cdot [1 + C / (a \cdot C + b)]$$

avec :
a = 0.5677
b = 1341.3

Pour d'autres solutés que le sel, on pourrait avoir des lois du même type mais avec d'autres coefficients.

En cas de prise en compte des effets de la température, d'autres lois de type ρ = f (C,T), sont disponibles : voir les figures 1 à 4.

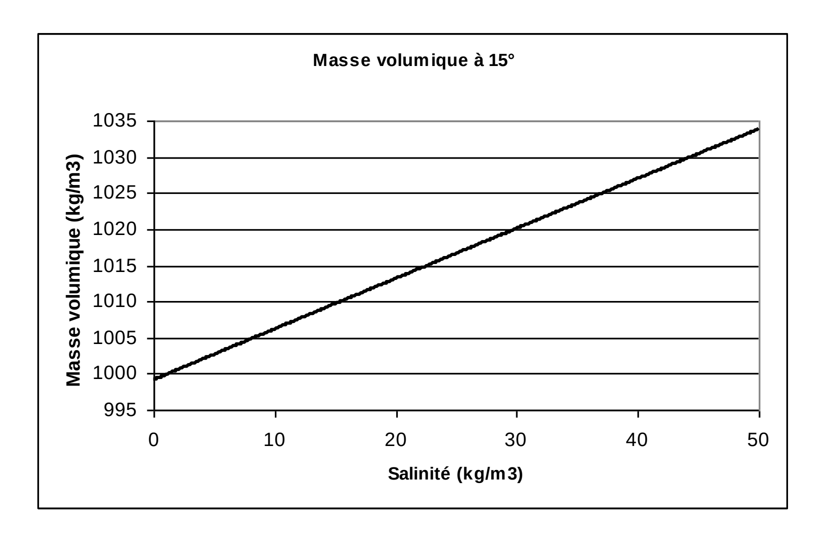


Fig. 1 - Masse volumique d'une solution saline à 15 °C en fonction de la salinité (concentration volumique en sel).

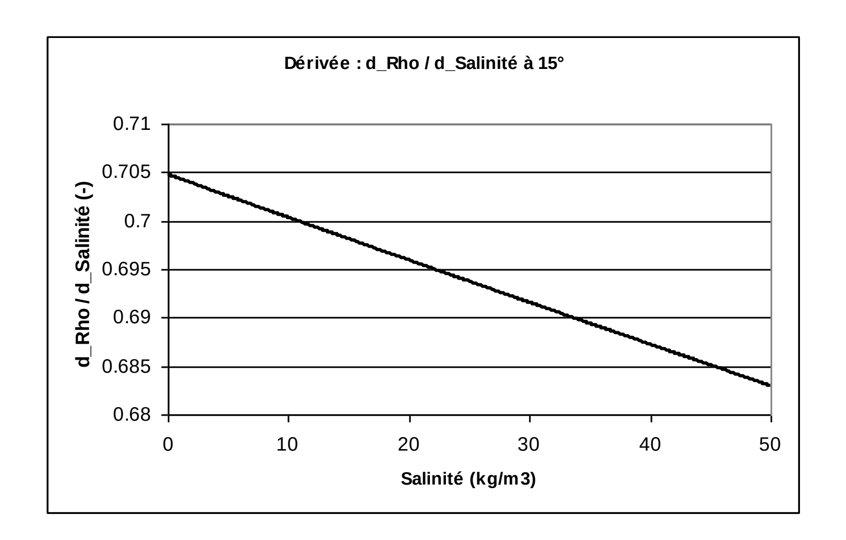


Fig. 2 - Dérivée de la masse volumique par rapport à la salinité (concentration en sel).

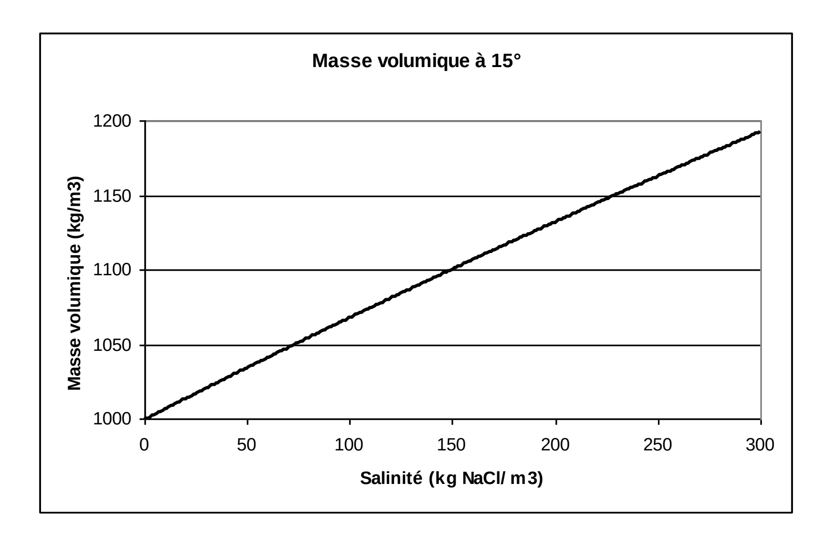


Fig. 3 - Masse volumique à 15 °C d'une solution saline fortement concentrée en fonction de la salinité.

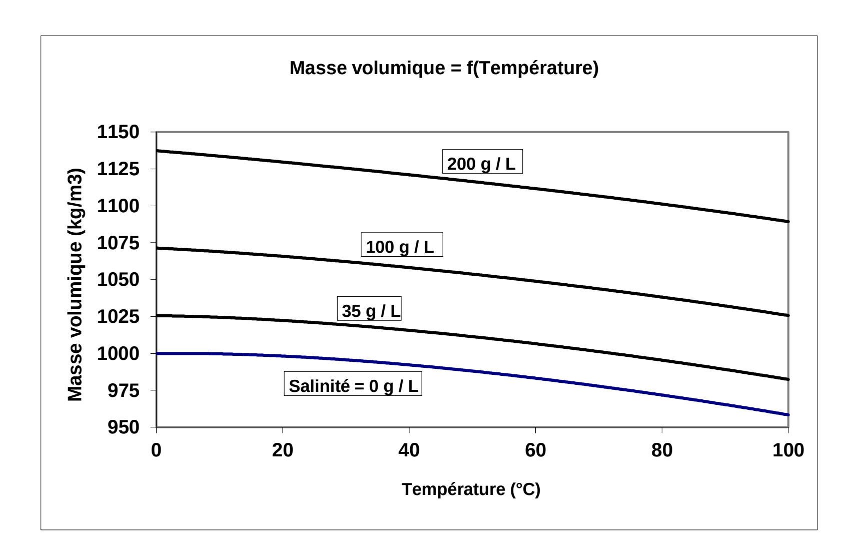


Fig. 4 - Variation de la masse volumique en fonction de la température (salinités 0, 35, 100 et 200 kg/m^3).

4.5.2. Nécessité du couplage

La salinité - d'où la masse volumique et la densité - est calculée par l'équation du transfert de masse. Cette équation (19) fait intervenir les débits d'échanges $\mathbf{Q_i}$ entre mailles. Or ces débits d'échanges sont calculés par la loi de Darcy, donnée par la relation (2), qui dépend elle-même des densités. Pour tenir compte de ce couplage on a choisi une méthode itérative (méthode de Picard) :

a) on part d'un champ initial de salinité (donc de densité) ;

b) on calcule les charges (ou les pressions), puis les débits d'échange, en fonction de ces densités par l'équation de conservation des débits (conservation des volumes, donc de la masse de fluide), qui utilise la loi de Darcy ;

c) on calcule les salinités par l'équation de conservation de la masse de soluté (équation du transport de masse) ;

d) on calcule le nouveau champ de densités à partir des salinités.

On boucle alors sur les actions b), c) et d).

Dans le cas d'un schéma de transport faisant intervenir des particules (Méthode des caractéristiques MOC), le modèle n'utilise qu'une seule itération de couplage puisque qu'après déplacement les positions des particules ne peuvent être reculées. Il faut donc a priori utiliser des pas de temps plus petits dans ce dernier cas.

4.5.3. Stabilisation du couplage par sous-relaxation

Le couplage itératif peut être instable ou oscillant, surtout en régime permanent, puisqu'une faible variation de densité peut entraîner de grandes variations de gradient de charge, qui vont entraîner à leur tour de grandes variations de débits, donc de plus grandes variations de densité. On introduit donc un coefficient de sous-relaxation, donc de ralentissement, $\mathbf{R_C}$ qui s'applique aux salinités (donc indirectement aux densités) :
On utilise la relation :

$$C_k = C_{k-1} + R_C \cdot (C - C_{k-1})$$

avec : C_{k-1} = Salinité à l'itération précédente **k**-1

C = Nouvelle salinité calculée par l'équation du transport de masse

C_k = Salinité actualisée à l'itération **k**

R_C = Coefficient de relaxation sur le couplage (< 1).

Les calculs sont d'autant plus stabilisés (et ralentis) que $\mathbf{R_C}$ est petit : si $\mathbf{R_C}$ = 1, il n'y a aucune stabilisation ; si $\mathbf{R_C}$ = 0, les densités ne sont plus actualisées. Le nombre d'itérations de couplage devra naturellement être augmenté si on utilise un coefficient $\mathbf{R_C}$ très inférieur à 1. Le nombre d'itérations de couplage devra au moins être égal à **Nc** défini par :

$$Nc = - 1.7 / \log_{10}(1 - R_C)$$

Ceci conduit aux valeurs suivantes :

Coefficient de Relaxation :	0.7	0.5	0.3	0.1	0.05	0.01
Nombre min. d'itérations :	3	6	11	37	76	390

La valeur du coefficient de relaxation de couplage à choisir dépend de la sensibilité du système à la densité. En effet, si on écrit la loi de Darcy en fonction des charges équivalentes en eau douce $\mathbf{H_d}$, les relations (4), (16) et (17) permettent d'obtenir :

$$V = - K \cdot [\mathrm{Grad}\,(H_d - z) + d \cdot \mathrm{Grad}\, z]$$

soit sous forme adimensionnelle :

$$- V/K = \mathrm{Grad}\, H_d + (d - 1) \cdot \mathrm{Grad}\, z$$

Î	Î
vitesse due au gradient de charge (douce)	vitesse due à l'effet de densité

Le coefficient de relaxation devra donc être d'autant plus petit que :

- les variations de densités sont grandes ;
- les variations de charges sont petites.

En pratique, en régime permanent, les coefficients de sous-relaxation de couplage peuvent varier de 0.2 à 0.3 pour les schémas stables, à 0.01 pour des systèmes peu stables (lentille d'eau douce en milieu poreux insulaire par exemple ou biseau salé avec fractures et très forts contrastes de perméabilité). En **régime transitoire** il peut être plus efficace d'utiliser un coefficient $\mathbf{R_C}$ égal à 1, mais associé à des pas de temps adaptés pour éviter les instabilités.

4.5.4. Réajustement des charges et des pressions

Après calcul des salinités, donc des densités, les pressions et les charges ne sont plus au pair. Le modèle les réajuste donc :

- si on a choisi une résolution en charge : les pressions sont recalculées à partir des charges et des nouvelles densités ;
- si on a choisi une résolution en charge douce ou en pression : les charges sont recalculées à partir des pressions et des nouvelles densités.

5. Description détaillée des paramètres relatifs à la prise en compte des effets de la densité

Le fichier des paramètres est créé ou modifié avec le module PARAMART.

5.1. UNITÉS DES DONNÉES

```
*** Unités des données                                 ***
 cm/s = Unité des Perméabilités des Aquifères en m/s (ou m2)
 1e-5 = Unité des Débits                  en m3/s (kg/s si Gaz)
    0 = Unité des Charges, Altitudes      en m
    0 = Unité des Emmagasinements Captifs en [-] ou 1/m
    0 = Unité des Emmagasinements Libres  en [-]
    0 = Unité des Hauteurs Hydroclimat. (Pluie,ETP,Infiltrat.) en mm
    0 = Unité des Hauteurs d'Excédent Irrigation              en mm
  MOI = Unité des Durées Hydroclimatiques  (SEC,MIN,HEU,JOU,MOI,ANN)
  JOU = Unité de Temps (des Pas de modèle) (SEC,MIN,HEU,JOU,MOI,ANN)
    0 = Unité des Coordonnées Horizontales des mailles  en m
    0 = Coefficient d'Anisotropie Verticale   Kv/Kh des Perméabilités
    0 = Coefficient d'Anisotropie Horizontale Kx/Ky des Perméabilités
    0 = Emm. Captif lus (0=Hydrog. 1=Spécif 2=Comprs 9999=Ttes cches)
->  0 = Unité des Salinités (Concentr_Dense) [Eau Douce = 0] en kg/m3
    0 = Unité des Concentrations                en kg/m3
->  % = Unité des Porosités = Teneurs en Eau en [-] [1e-2 si en %]
    0 = Unité des Stocks d'eau en m3
->  0 = Unité des Masses en kg
    0 = Type de Perméab :(0=Def=Perméab à l'eau  ;  1=Perméab intrins)
    0 = Unité des Volu. pour Concen 'Chimiques' [Def = 1/1000 = litre]
->  0 = Type de Débits Mass. et d'Énergie lus : (Def=par maille ; 'm2'=par m2)
```

On décrit ici uniquement les paramètres nécessaires à la prise en compte des effets de densité.

5.1.1. Unité des salinités

C'est l'unité de concentration volumique de « soluté dense ».

5.1.2. Unité des porosités et teneurs en eau

Voir le rapport décrivant le transport de masse classique.

5.1.3. Unité des masses

Voir le rapport décrivant le transport de masse classique.

5.2. POINT ORIGINE ET ÉTAT DES DONNÉES

```
*** Point origine et état des données              ***
   0 = Référence des Charges    (Charges modèle = Charges lues + Ref.)
   0 = Référence du Substratum  (Substr. modèle = Substr. lus  + Ref.)
   0 = Épaisseur Tranche de coupe (Unité de Coord. de Mailles ou Deg.)
-> 0 = État initial lu [0=Charg 1=Press 2=Satur 3=NAQ 4=S_Liq 5=S_NAQ]
   1 = Pesanteur : 0=Oz->Bas ; 1=Oy->Bas (Coupe Vertic.) ; 2=Ox Droite
   0 = Angle correcteur (Degrés) de la Direction de la Pesanteur
   0 = Effet Angle correcteur : 0=Orthonormé  1=Escalier (Cavalière)
   0 = Initialisation des Nombres Aléatoires (Particules)  [Def=1789]
   0 = Générateur des Nombres Aléatoires : [Def=0=Rapide  1,2=Autre]
   0 = Calcul à symétrie Cylindrique (Radial)      [0=Non 1=Oui]
   0 = Viscosité (dynam.) de l'Eau si Perméab. Intrins. [Def=1.002e-3]
   0 = État Ini 2 [Mul_Phas] 1=NAQ 2=AQU 3=Sat 4=S_Liq 5=S_NAQ [Def=1]
   0 = Compressibilité de l'Eau (1/m)  [Def=5e-6]
```

5.2.1. État initial lu

Les données lues sur les fichiers se rapportent à :

- la salinité (donc la masse volumique) ;
- la charge (réelle) ;
- la pression.

Étant donné qu'il existe une relation entre ces 3 variables : $H = z + h \,.\, \rho_o / \rho$, il serait redondant de les calculer toutes les 3. Le modèle conserve la valeur de la salinité. On lui indique donc par ce paramètre s'il faut retenir la charge réelle (cas général) ou la pression (en hauteur d'eau douce).

0 : le modèle retient la **charge** (réelle) **H**. Il en déduit la pression **h**.
1 : le modèle retient la **pression h**. Il en déduit la charge (réelle) **H**.

À chaque fois que c'est possible, il est conseillé de choisir une initialisation en **charge** (valeur par défaut).

5.3. COUPLAGE ET TRANSPORT

```
*** Couplage et Transport Densité,chaleur,concentr. ***
->    15 = Nombre maximal d'Itérations pour *Couplage* Densité/Pression
->     0 = Coef de Relaxation pour Couplage Densité/Pression [Def=1]
->     0 = Nbre max d'Itérat *Transport* Densit/Chaleur/Conc. [Def=20]
->     0 = Schéma de Transport [0=D_Finies 1=Rand_W 2=Carac=MOC  3=TVD]
* 6.6e-6 = Diffusion moléculaire   (m2/s)  [* = Spatialisée]
*      0 = Dispersivité Longitudinale (m)  [* = Spatialisée]
*      0 = Dispersivité Transversale  (m)  [* = Spatialisée]
       0 = Transport Permanent Préliminaire avant transitoire [Def=0]
       0 = Édition des posit. de Particules en fin de calcul (-1=Bin)
       0 = Lecture d'un fichier de Position Initiales des Particules
       0 = Nombre de Sous-Pas pour les Particules R.W. [Def=1]
       0 = Méthode de réflection des Particules R.W. (0=Non  1=Ito)
->     1 = Affichage des Bilans Massiques Cumulés (0=Oui ; -1=Non)
->     1 = Solveur calcul de Transport : 1=ORTHOMIN ; 2=Itér  [Def=1]
       0 = Omission des Termes Diago en D. Finies (0=Complet 1=Omiss.)
->     0 = Conc./Tempér Non limitées par min/max [Def=Limit. 1=non Lim]
       0 = Nombre Maxi d'Itér pour Sorption Langmuir/Freundlich [Def=20]
       0 = Coef de Relaxation pour Sorption Langmuir/Freundlich [Def=1]
       0 = Schéma TVD Complet [0=Allégé=Standard (Rapide) ; 1=Complet]
->     0 = Rapport Dispersiv Transv. Vertic. / Dispersiv Transv. Horiz.
```

5.3.1. Nombre maximal d'itérations pour le couplage

Ce paramètre définit le nombre maximal d'itérations de couplage entre les calculs d'hydraulique (charges ou pressions) et les calculs de transport. (Si on donne la valeur 0 à ce paramètre il n'y aura pas de couplage, donc pas de calcul de la salinité).

0 = Pas de couplage, donc pas de calcul de la salinité.

N > 0 = Au maximum N cycles de calculs, formés chacun d'un calcul d'hydraulique (charges) suivi d'un calcul de transport de la salinité. Le couplage se termine au plus tard après ces N itérations de couplage. Il se termine avant si la variation de charge en début de calcul des charges, est inférieure au seuil de convergence des charges. En régime permanent (pour le calcul du transport) le nombre d'itérations de couplage peut être assez grand (20 ou 100) surtout si le couplage est fort, avec des calculs instables qui nécessitent un coefficient de sous-relaxation $\mathbf{R_C}$ très inférieur à 1.

Le nombre d'itérations de couplage devra au moins être égal à **Nc** défini par :

$$Nc = - 1.7 / Log_{10}(1 - R_C)$$

Ceci conduit aux valeurs suivantes :

Coefficient de relaxation	0.7	0.5	0.3	0.1	0.05	0.01
Nombre min. d'itérations	3	6	11	37	76	390

En régime transitoire, avec de petits pas de temps, seules quelques itérations de couplage sont nécessaires.

Dans le cas d'un schéma de transport faisant intervenir des particules (Méthode des caractéristiques MOC), le modèle n'utilise qu'une seule itération de couplage puisque qu'après déplacement, les positions des particules ne peuvent être reculées. Le coefficient de sous-relaxation doit alors être égal à 1. Il faut donc, *a priori*, utiliser des pas de temps plus petits dans ce dernier cas.

5.3.2. Coefficient de relaxation pour le couplage Densité/Pression/Chaleur

Ce paramètre définit le coefficient de sous-relaxation pour le couplage entre les calculs d'hydraulique (charges) et les calculs de transport (salinité).

En régime permanent (pour le calcul du transport) il peut être nécessaire d'utiliser un faible coefficient de sous-relaxation, de l'ordre de 0.3 ou même 0.1 ou 0.01, surtout si le couplage est fort, avec des calculs instables. Le nombre d'itérations de couplage devra naturellement être augmenté si on utilise un coefficient $\mathbf{R_C}$ très inférieur à 1. En régime transitoire, avec de petits pas de temps, un coefficient de sous-relaxation de 1 (valeur par défaut) peut convenir.

5.3.3. Diffusion moléculaire

Ce paramètre, décrit dans le rapport sur le transport de masse classique, peut être spatialisé si on lui donne la valeur « ***** ». On peut alors définir (dans le fichier projet, ou bien dans les « modifications initiales ») la variable DIFFUS_MOLEC d'extension de fichier [.dimol].

5.3.4. Dispersivité longitudinale

Ce paramètre, décrit dans le rapport sur le transport de masse classique, peut être spatialisé si on lui donne la valeur « ***** ». On peut alors définir (dans le fichier projet, ou bien dans les « modifications initiales ») la variable DISPER_LONGI d'extension de fichier [.alfal].

5.3.5. Dispersivité transversale

Ce paramètre, décrit dans le rapport sur le transport de masse classique, peut être spatialisé si on lui donne la valeur « ***** ». On peut alors définir (dans le fichier

projet [.rma], ou bien dans les « modifications initiales ») la variable DISPER_TRANSV d'extension de fichier [.alfat].

5.4. DENSITÉ

```
*** Densité                                            ***
  Douce = Effet de la Densité (0=Non 1=Charge 2=Pression 3=Charge Douce)
      1 = Loi Densité(Salinité) (0=Non 1=Linéaire 3=Schlum_VDB)
      1 = Dérivée de la loi Densité/Salinité [si loi Linéaire] [Def=0.7]
(P)   0 = Masse de chaque Particule de Salinité (si particules)
   1e-4 = Variation moy de Salinité entre 2 itérat. pour convergence
Transit = Régime Transport Salinité [0=Transitoire  1=Permanent]
(P)   0 = Nombre maxi possible de Particules (MOC ou R.W.) [Def=30000]
(P)   0 = Durée <==> Permanent si transport MOC ou R.W. en Perma [Def=0]
      0 = Coefficient de retard [-] Si pas ZNS [Def=1]
      0 = Temps de Demi-Dégradation (unité de temps) [Def=0]
      1 = Calcul de la Salinité (Concen_Dense) (Transport)
```

N.B. Les paramètres marqués (**P**) ne concernent que les schémas de transport faisant intervenir des **P**articules : MOC (ou Random Walk).

5.4.1. Effet de la densité

Il faut donner à ce paramètre la valeur suivante :

0 = pas de prise en compte de la densité : calcul standard des charges ;

1 = prise en compte de la densité. Résolution en Charges réelles (**conseillé**);

2 = prise en compte de la densité. Résolution en Pression (**déconseillé**) ;

3 = prise en compte de la densité. Résolution en Charges d'eau douce.

Il convient de noter que si on donne une valeur positive à ce paramètre il y aura **prise en compte** des effets de la densité (résultant de la salinité initiale lue par le modèle), mais pas forcément **calcul** de la salinité. Le calcul de la salinité est choisi par le paramètre n° 11 de ce paragraphe de paramètres.

5.4.2. Loi reliant la masse volumique du fluide à La salinité

0 = Pas de dépendance

1 = Dépendance linéaire : $\rho = 1000 + a \cdot C$ (**a** est défini par le paramètre suivant)

3 = Relation Schlumberger (Vandenbeusch, 1976 révisée), valable jusqu'à une concentration en NaCl de plus de 250 kg/m^3 :

$$\rho = 1000 \cdot [1 + C / (1341.3 + 0.5677 \cdot C)].$$

En cas de prise en compte des effets de la **température**, d'autres lois de type ρ = f (C,Tempér), sont disponibles. Ces lois, qui sont choisies dans le paragraphe « Température » du fichier des paramètres, seront décrites dans un rapport (ultérieur) relatif aux effets thermiques. En particulier on peut utiliser la relation ρ = f (C,Tempér) de Schlumberger (Vandenbeusch, 1976 révisée) valable jusqu'à une concentration en NaCl de plus de 250 kg/m^3 et une température de 102 °C.

5.4.3. Dérivée : (Masse Volumique du fluide) / (Salinité)

Ce paramètre n'est utilisé que si on a choisi une dépendance linéaire. C'est le paramètre **a** de la loi linéaire. Si on a choisi une relation Schlumberger (loi n°3), ce paramètre n'est pas utilisé.

Par défaut la dérivée **a** est fixée à 0.70. En effet, on admet généralement, pour l'océan Atlantique, une salinité de 35 kg de NaCl par m^3 de solution, qui engendre une eau salée de masse volumique de 1025 kg/m^3. On obtient ainsi une dérivée :

a = (1025 - 1000) / 35 = 0.71

On peut cependant utiliser d'autres valeurs de **a** et choisir par exemple :

- « Salinité » de l'eau de mer = 25 kg/m^3
- Dérivée **a** = 1

d'où une masse volumique ρ = 1000 + 1 . C => 1025 kg/m^3 pour l'eau de mer.

Si la salinité est exprimée en kg/m^3 d'ion Cl^-, **a** sera de l'ordre de 1.15, ou bien de 1.15 10^{-3} si la salinité est exprimée en mg/l d'ion Cl^- .

Si on considère un fluide **plus léger** que l'eau, par exemple un fluide chaud, on pourra avoir une dérivée **a** négative, par exemple **a** = -2 ; ρ = 1000 - 2 . C => ρ = 800 kg/m^3 pour une salinité de 100 unités de salinité.

5.4.4. Variation moyenne de salinité entre 2 itérations pour accepter la convergence

Voir le chapitre ou le rapport décrivant le transport de masse classique.

C'est le critère de convergence pour les calculs de salinité (au sein d'une itération de couplage). Un ordre de grandeur pour ce paramètre est d'environ 10^{-5} fois la salinité moyenne du champ étudié. Par défaut ce paramètre a pour valeur 10^{-8} unités de salinité.

N.B. Ce paramètre n'est pas utilisé si on choisit un calcul de transport par la méthode Random Walk (déconseillée).

5.4.5. Régime de transport de la salinité : Transitoire ou Permanent

Voir le chapitre ou le rapport décrivant le transport de masse classique.

« Transit » ou 0 = Transport de la salinité en régime Transitoire

« Perman » ou 1 = Transport de la salinité en régime Permanent

(Donc par défaut le transport se fait en régime Transitoire).

5.4.6. Calcul de la salinité (transport)

C'est ce paramètre qui permet de demander un **calcul** de la salinité par résolution de l'équation de transport.

0 = Pas de calcul de la salinité. (Mais possibilité, si on l'a demandé : paramètre n° 1, d'utiliser un champ de salinité initiale lue par le modèle). L'intérêt de cette option est de permettre de faire un calcul rapide avec un champ de salinité estimée. Cette option permet aussi, de manière un peu détournée, de définir des conditions limites en pression dans un écoulement sans prise en compte de la salinité.

1 = Calcul de la salinité (en résolvant l'équation du transport par différences finies, par la méthode MOC, ou par RW). L'effet de la densité sera pris en compte dans le calcul hydrodynamique par une résolution en **charge**, en **charge d'eau douce**, ou en **pression** selon le choix du paramètre n° 1 de ce paragraphe. Par défaut, si on avait laissé ce paramètre n° 1 égal à 0, la résolution se ferait en Charge réelle (d’eau salée).

Comme indiqué plus haut, pour réaliser un calcul de la salinité il faut avoir fixé, dans le paragraphe « Couplage », un nombre maximal d'itérations de couplage.

Rappelons que pour faire un calcul de transport : il faut définir un champ de porosités (cinématiques). Ce champ est utilisé explicitement si le transport se fait en régime transitoire, et dans tous les cas où on prend en compte des coefficients de dispersions.

5.5. ÉDITION DES RÉSULTATS

5.5.1. Mailles à historiques

Il est possible de sélectionner certaines mailles du modèle pour lesquelles on souhaite éditer sur fichier l'évolution au cours du temps des salinités (variable SALINITE) ou des salinités sortantes (SALINIT_SORT). Comme pour les historiques de concentration classique cette sélection s'effectue dans le paragraphe « historiques » du fichier des paramètres. Les historiques des mailles sélectionnées sont édités dans le fichier de nom « historiq.prn » (et historiq.out) habituel.

5.5.2. Champs (grilles MARTHE) des états calculés

À n'importe quel pas de temps, il est possible d'éditer les « grilles MARTHE » des salinités calculées. La méthode de sélection est identique à celle utilisée pour les autres variables éditables (concentration par exemple) :

- Salinité et masse volumique :

  on sélectionne l'objet : SALINITE

  puis l'action ÉDITION

  on choisit alors d'éditer :

  - les salinités

  - les variations de salinité depuis le début de la simulation

  - la masse volumique calculée : elle est exprimée en kg/m^3.

Les valeurs calculées des variables sélectionnées sont éditées sous forme de « grilles MARTHE », en format texte ou en binaire, dans le fichier de nom « chasim.out ». En outre si le modèle est monodimensionnel les valeurs apparaissent, en format libre, dans le fichier séquentiel « chasimsq.out » et « chasimsq.prn ».

- Débits massiques de salinité :

  on sélectionne l'objet : QMASS_SALIN

  puis l'action ÉDITION.

  On obtient la grille des débits massiques échangés par les limites (ils correspondent à ceux obtenus avec la variable QMASS_CONC dans les calculs de transports classiques). Ces débits massiques sont édités dans le fichier de nom « debmas.out » Ils sont exprimés en unité de masse par unité de temps.

5.6. CALAGE AUTOMATIQUE

Il est possible de faire un calage automatique en utilisant des observations sous forme :

- de grilles MARTHE d'observations de salinité ;
- d'historiques d'observations de salinité ;
- d'historiques d'observations de salinité sortantes.

Tous les paramètres qui ont une influence sur ces variables peuvent être optimisés : perméabilités, porosités, dispersivités etc.

6. Vérification du modèle et exemples d'applications

6.1. EXEMPLE D'APPLICATION N°1 : BISEAU SALÉ DE HENRY EN RÉGIME PERMANENT

6.1.1. But de l'exemple n°1

Cet exemple classique illustre le déroulement du calcul couplé en régime permanent en coupe verticale pour simuler un biseau salé.

6.1.2. Description de l'exemple n°1

Il s'agit d'un système aquifère horizontal de 200 cm de large sur 100 cm de haut, modélisé en coupe verticale. La mer est située sur la limite droite, et un débit d'eau douce de 660 10^{-7} m^3/s, par m d'épaisseur de coupe, arrive par la limite gauche.

Les paramètres hydrodynamiques sont les suivants :

Perméabilité	: K	= 1.0 10^{-2} m/s
Porosité	: ω	= 35 %
Diffusion	: D	= 6.6 10^{-6} m^2/s
Dispersivités	:	= 0

Maillage :

Il est composé de 41 colonnes et 20 lignes de mailles 5 cm x 5 cm de coté. (La colonne 41, la limite à la mer, a une largeur différente égale à 0.1 cm).

Loi de densité : Loi linéaire $\rho = 1000 + 1 . C$

Conditions aux limites :

Limite ouest	: Salinité extérieure = 0, débit d'eau douce = 33 10^{-7} m^3/s sur chaque maille.
Limite est	: Salinité extérieure = 25 kg/m^3, charge imposée = 0. sur chaque maille.

État initial :

Salinité	: Salinité = 0 partout sauf 25 kg/m^3 sur la limite est
Hydrodynamique	: Charges = 0 partout.

6.1.3. Paramètres du modèle

a) Description des paramètres

Couplage :

Itérations de couplage	=	25
Sous-relaxation de couplage	=	1

Hydrodynamique :

Régime	=	Permanent
Méthode	=	Gradients Conjugués : en charge d'eau douce
Nombre maximal d'itérations	=	3 (50 itérations internes)

Transport :

Régime	=	Permanent
Méthode de calcul	=	Différences Finies ; Solveur Orthomin
Nombre maximal d'itérations	=	défaut (20 itérations)

b) Extrait du Fichier des Paramètres du modèle

On présente ci-dessous un extrait du fichier des paramètres de MARTHE

```
Biseau Henry : Maillage Fin : *Permanent*
Diffusion = 6.6E-6 : Calcul en Charges d'eau douce
 *** Point origine et état des données               ***
    0 = Référence des Charges   (Charges modèle=Charges lues + Refer.)
    0 = Référence du Substratum (Substr. modèle=Substr. lus  + Refer.)
  100 = Épaisseur Tranche de coupe (Unité de Coord Mailles ou Degrés)
    0 = État init lu [0=Charg 1=Press 2=Satur 3=NAQ 4=S_Liq 5=S_NAQ]
    1 = Pesanteur : 0=Oz->Bas ; 1=Oy->Bas (Coupe Vertic) ; 2=Ox Droite
    0 = Angle correcteur (Degrés) de la Direction de la Pesanteur
    0 = Effet Angle correcteur : 0=Orthonormé  1=Escalier (Cavalière)
    0 = Initialisation des Nombres Aléatoires (Particules)  [Def=1789]
    0 = Générateur des Nombres Aléatoires : [Def=0=Rapide  1,2=Autre]
    0 = Calcul à symétrie Cylindrique (Radial)      [0=Non 1=Oui]
    0 = Viscosité (dynamique) de l'Eau si Perméab Intrinsèque
    0 = État Initial 2 [MultiPhas] 1=NAQ 2=AQU 3=Satur 4=S_Liq 5=S_NAQ
*** Couplage et Transport Densité,chaleur,concentr. ***
   25 = Nombre maximal d'Itérations pour *Couplage* Densité/Pression
    0 = Coef de Relaxation pour Couplage Densité/Pression [Def=1]
    0 = Nombre max d'Itérat *Transport* Densité/Chaleur/Conc. [Def=20]
```

```
    DF = Schéma de Transport [0=D_Finies 1=Rand_W  2=Caract=MOC  3=TVD]
6.6e-6 = Diffusion moléculaire   (m2/s)  [* = Spatialisée]
     0 = Dispersivité Longitudinale (m)  [* = Spatialisée]
     0 = Dispersivité Transversale  (m)  [* = Spatialisée]
     0 = Transport Permanent Préliminaire avant transitoire [Def=0]
     0 = Sauvegarde des positions de Particules en fin de calcul
     0 = Lecture d'un fichier de Position Initiales des Particules
     0 = Nombre de Sous-Pas pour les Particules R.W. [Def=1]
     0 = Méthode de réflection des Particules R.W. (0=Non  1=Ito)
     1 = Affichage des Bilans Massiques Cumulés (0=Oui ; -1=Non)
     1 = Solveur pour calculs de Transport : 1=Orthomin ; 2=Itérat
     0 = Omission des Termes Diago en Dif. Finies (0=Complet 1=Omiss.)
*** Densité                                        ***
Douce  = Effet de la Densité (0=Non 1=Charge 2=Pression 3=Charge Douce)
    1  = Loi Densité(Salinité) (0=Non 1=Linéaire 3=Schlum_VDB)
    1  = Dérivée de la loi Densité/Salinité [si loi Linéaire] [Def=0.7]
    0  = Masse de chaque Particule de Salinité (si particules)
 1e-4  = Variation moy de Salinité entre 2 itérat. pour converg.
Perman = Régime Transport Salinité [0=Transitoire  1=Permanent]
    0  = Nombre maxi possible de Particules (MOC ou R.W.) [Def=30000]
    0  = Durée <==> Permanent si transport MOC ou R.W. en Perma [Def=0]
    0  = Coefficient de retard [-] Si pas ZNS [Def=1]
    0  = Temps de Demi-Dégradation (unité de temps) [Def=0]
    1  = Calcul de la Salinité (Concen_Dense) (Transport)
*** Initialisation avant calculs                   ***
  /POROSITE  /SEMIS N: =35
  /CHARGE    /SEMIS N: =0
  /SALINITE  /MAILL C=     41L=      1P=      *V=     25;
  /SALIN_EXT /MAILL C=      1L=      1P=      *V=      0;
  /SALIN_EXT /MAILL C=     41L=      1P=      *V=     25;
  /CHARGE    /SEMIS N: =0
  /DEBIT     /MAILL C=      1L=      1P=      *V=     33;
  /DEBIT     /MAILL C=     41L=      1P=      *V=   9999;
  /*****     /***** Fin d'Initialisation
 *** Fin du fichier des Paramètres Généraux         ***
```

6.1.4. Résultats de la modélisation

a) Récapitulation du couplage

Ce tableau résume la convergence des calculs au cours du couplage. Il présente les informations suivantes :

- Col 2 : Somme des débits résiduels avant calcul hydrodynamique ;
- Col 3 : Variation moyenne (en valeur absolue) de charge ;
- Col 4 : Variation moyenne (en valeur absolue) de la salinité ;
- Col 5 : Variation algébrique moyenne de la salinité ;
- Col 6 : Variation maximale de charge ;
- Col 7 : Variation maximale de salinité ;
- Col 8 : Écart de bilan massique global (toutes les 10 itérations).

À la fin de ce tableau apparaît la période de décroissance (pour les dernières itérations) si elle est monotone. Dans cet exemple on voit que la somme des débits résiduels est divisée par 2 toutes les 4.7 itérations de couplage.

Biseau Salé Henry : Maillage Fin : *Permanent* :
Diffusion = 6.6E-6 : Calcul en Charges d'eau douce
Récapitulation Couplage : Variations à la Première Itération

		<--- Moyenne/Mailles ----->			<- Valeur Maxi ->		
Num			V_Absol	V_Algébr.			%
Cpl	Q_Rési	Charge	Salinité	Salinité	Charge	Salinité	Bil_Mas
1	4.97E+04	1.91	3.92	3.70	2.56	25.00	0.00
2	2.54E+03	4.78E-02	2.41	-1.10	0.449	17.31	0.00
3	1.82E+03	1.57E-02	1.74	1.07	-0.119	15.91	0.00
4	1.37E+03	8.80E-03	1.18	-0.126	0.106	11.05	0.00
5	9.76E+02	9.44E-03	0.846	0.259	9.36E-02	9.08	0.00
6	7.70E+02	4.31E-03	0.526	-3.91E-02	-3.75E-02	5.32	0.00
7	4.75E+02	3.30E-03	0.367	0.101	3.66E-02	3.28	0.00
8	3.58E+02	2.64E-03	0.226	-7.06E-02	2.86E-02	1.96	0.00
9	2.24E+02	2.11E-03	0.151	7.06E-02	-2.37E-02	1.58	0.00
10	1.56E+02	1.81E-03	0.109	-4.51E-02	2.07E-02	1.10	0.711
11	1.17E+02	1.29E-03	9.24E-02	2.44E-02	-1.33E-02	0.848	0.00
12	92.91	9.78E-04	8.42E-02	-6.08E-03	7.89E-03	0.752	0.00
13	79.95	8.24E-04	7.07E-02	-3.06E-03	8.36E-03	0.584	0.00
14	65.99	7.02E-04	5.63E-02	6.35E-03	-7.50E-03	0.443	0.00
15	53.81	5.44E-04	4.25E-02	-4.05E-03	5.85E-03	0.317	0.00
16	42.22	3.67E-04	3.10E-02	8.54E-04	-3.83E-03	0.259	0.00
17	31.59	2.77E-04	2.29E-02	2.26E-03	-2.24E-03	0.220	0.00
18	23.27	2.34E-04	1.81E-02	-3.54E-03	2.50E-03	0.172	0.00

```
19    17.82 1.99E-04 1.44E-02  3.43E-03 -2.23E-03    0.128     0.00
20    14.33 1.53E-04 1.09E-02 -2.21E-03  1.68E-03 8.92E-02    0.172
21    11.22 1.07E-04 8.34E-03  8.06E-04 -1.08E-03 7.71E-02     0.00
22     8.69 8.23E-05 6.83E-03  2.30E-04 -7.01E-04 6.44E-02     0.00
23     6.74 7.00E-05 5.76E-03 -6.67E-04  7.48E-04 4.93E-02     0.00
24     5.50 5.89E-05 4.54E-03  5.68E-04 -6.53E-04 3.67E-02     0.00
25     4.46 4.26E-05 3.52E-03 -2.31E-04  4.78E-04 2.56E-02     0.00
Pério   3.1     3.1       3.1                          2.3
Monot                            ------    ------
```

b) Bilan des débits du fluide

Les débits sont en 10^{-7} m^3/s.

```
- Bilan en unités de Débit : Pas de temps n° 0 - t= 0.000 -------
Débits Entrant /Charges Impos. =  158.998
Débits Sortant /Charges Impos. =           -818.997
Débits Entrant dans les Mailles=  660.159           (660.00 Imposé)
Débits Sortant des Mailles     =            -0.1606
-----------------------------------------------------------------
Bilan de Contrôle        = -5.679E-11  (Somme de tous les débits)
Débit Résiduel d'Err     =     0.3240  (Somme Val. abs. débits résid)
Débits Internes signif.  =    660.004      0.000
            Bilan Global = 4.728E-03

Débit   Résiduel Max        =  4.091E-03 Col: 28 , Lig: 1 , Cou: 19
 soit un Écart de Charge de   :  1.023E-06
 Hauteur Rési d'Err Maximale =  1.023E-06 Col: 28 , Lig: 1 , Cou: 19
```

c) Bilan Massique du soluté

```
                =======================================
                 Bilan du Transport de la Salinité    :
                =======================================
```

Les masses sont en 10^{-3} kg et les temps sont en minutes.

```
Bilan en unité de Masse/unité de Temps : Pas de temps n° 0 - t= 0.
    (c'est-à-dire en : 1.667E-05 kg/s)
                          Entrant       Sortant        Net
par les Limites      =     23.850        -23.859     -9.813E-03

Mailles Internes Rési=  5.810E-02     -4.829E-02      9.813E-03
----------------------------------------------------------------
Bilan de Contrôle    = -1.618E-13  (Somme totale y compris résidus)
```

```
Somme Résidus Intern =     0.1064  (Somme Val. absol. résidus)

Somme val abs des résidus   =     0.1064  Plus grande composante = 23.859
=> Converg. Interne Masse à :     0.4459 %  (d'erreur)
Écart de bilan Masse global = -9.813E-03    (Entrées/sorties)
=> Converg. Masse globale à :  4.113E-02 %  (d'erreur)
```

d) Dessins (en coupe verticale)

La figure 5 présente les isosalinités (kg/m^3) qui forment un biseau salé avec une bande de mélange due à la diffusion. Les flèches indiquent la direction et l'intensité de la vitesse locale. On voit que l'eau douce provenant de la gauche, étant plus légère, s'écoule en passant au-dessus du biseau. On voit apparaître un mouvement de circulation de l'eau salée qui rentre en bas à droite et se mélange à l'eau douce. La figure 6 présente les charges réelles (en cm). Elle montre nettement que les vitesses ne sont pas perpendiculaires aux isocharges.

La figure 7 présente les charges calculées exprimées en hauteur d'eau douce (en cm). Elle montre que les vitesses ne sont pas perpendiculaires aux isocharges en eau douce. La figure 8 présente les pressions calculées (en cm). Les isopressions sont quasi horizontales bien que l'écoulement soit lui aussi globalement horizontal.

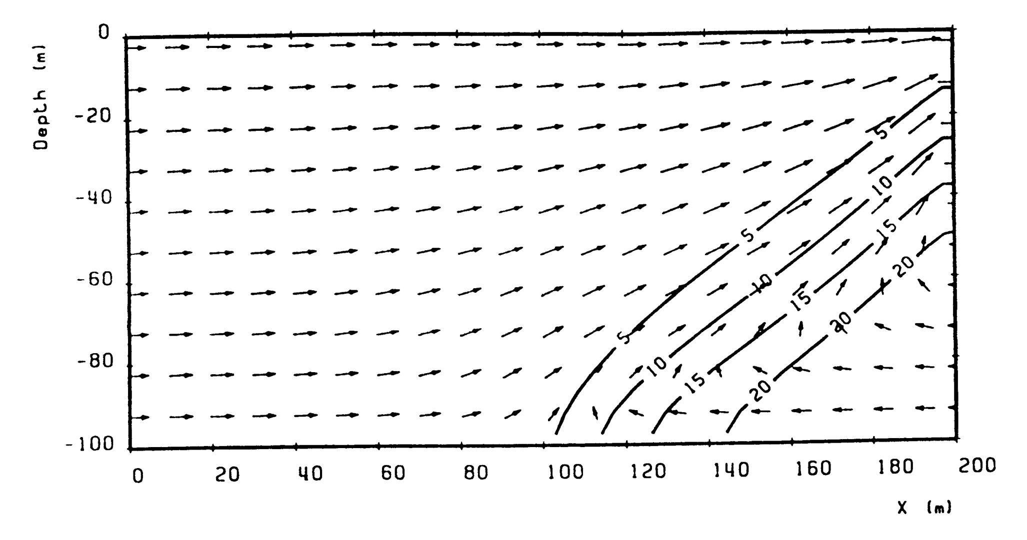


Fig. 5 - Biseau salé de Henry modélisé en coupe : salinités calculées (kg/m^3).

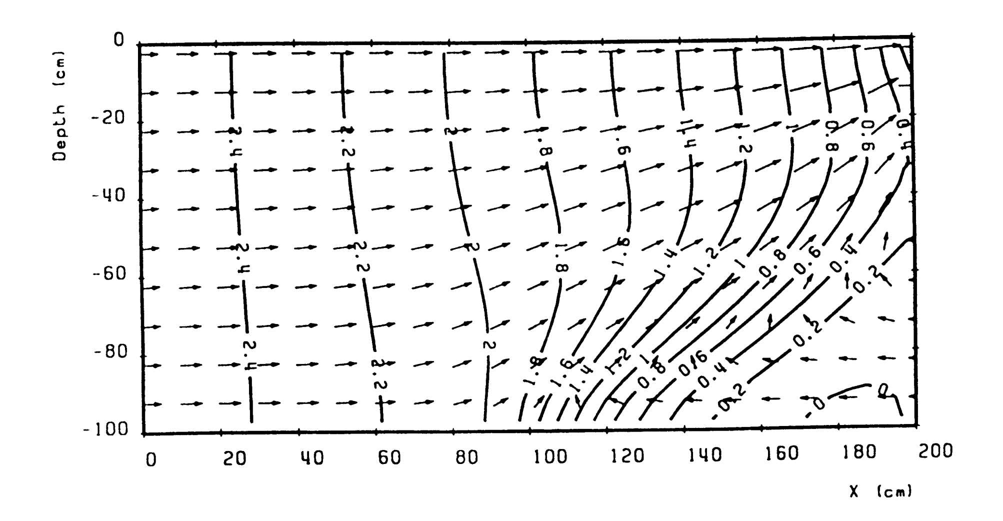


Fig. 6 - Biseau salé de Henry modélisé en coupe : charges réelles calculées (cm).

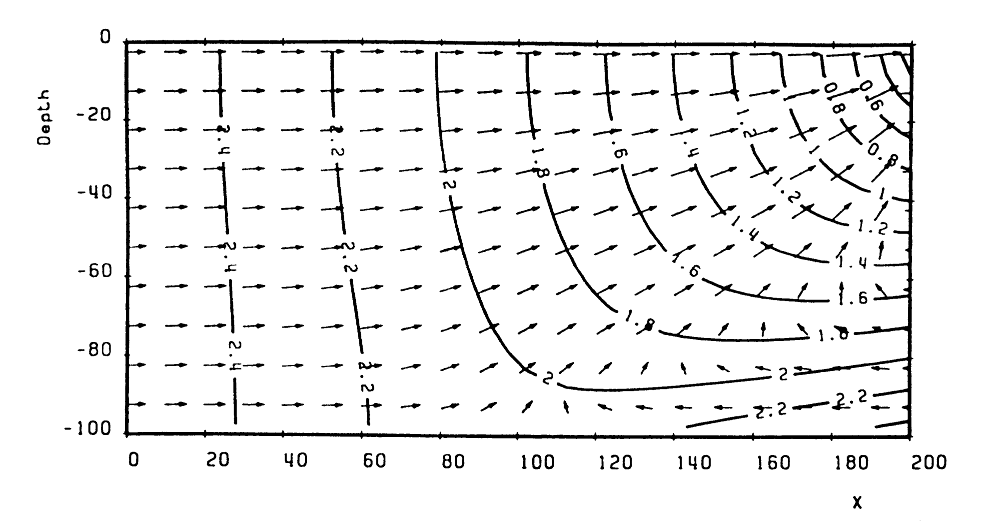


Fig. 7 - Biseau salé de Henry : charge en eau douce calculées (cm).

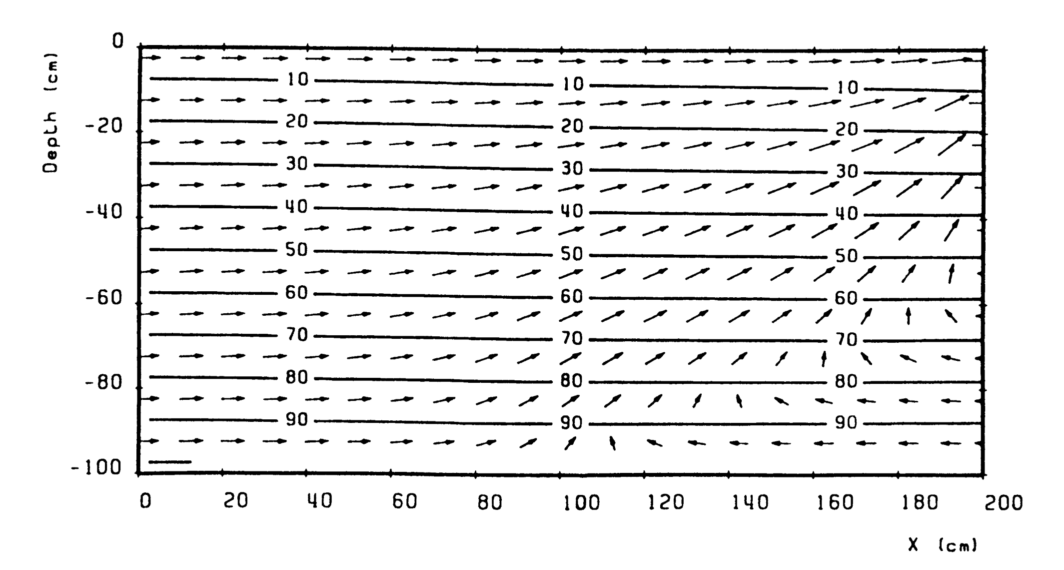


Fig. 8 - Biseau salé de Henry : pressions calculées (cm).

6.1.5. Variante avec une salinité plus forte

On a réalisé la même simulation mais avec de l'eau salée de masse volumique 1080 kg/m^3 au lieu de 1025, donc avec un couplage plus fort. Un calcul sans sous relaxation ne peut alors pas converger. Le tableau suivant présente la récapitulation du couplage.

Biseau Salé Henry : Maillage Fin : *Permanent* :
Diffusion = 6.6E-6 : Calcul en Charge d'eau douce
Masse volumique=1080 kg/m^3 - Sans relaxation

Récapitulation Couplage : Variations à la Première Itération

		<- Moyenne/Mailles		---->	<-Valeur Maxi->		
Num			v_absol	v_algèbr.			%
Coupl	Q_résid	Charge	Salinit	Salinité	Charge	Salinité	Bil_Mas
1	1.58E+05	4.66	8.76	6.37	7.38	78.41	0.00
2	1.40E+04	0.405	7.44	-1.27	2.17	53.77	0.00
3	1.37E+04	0.231	4.20	1.88	0.912	25.71	0.00
4	1.36E+04	0.158	4.86	-0.538	0.635	31.44	0.00
5	1.31E+04	0.175	4.51	0.436	0.976	28.52	0.00
6	1.37E+04	0.159	3.48	-2.48E-2	-0.610	19.94	0.00
7	1.26E+04	0.185	5.00	-0.469	0.633	38.61	0.00
8	1.34E+04	0.212	3.71	0.552	0.762	25.14	0.00
9	1.34E+04	0.234	4.60	-0.467	-1.02	32.03	0.00
10	1.38E+04	0.205	4.12	0.738	0.978	29.02	51.94
11	1.36E+04	0.167	3.90	-0.209	-0.834	25.10	0.00

```
 ..     ...      ...     ...       ...      ...      ...        ...
 19  1.26E+04  0.190   5.12    -0.443    0.666    39.85      0.00
 20  1.35E+04  0.217   3.66     0.552    0.772    24.50     29.85
 21  1.33E+04  0.231   4.68    -0.524   -0.993    32.54      0.00
 22  1.38E+04  0.202   4.02     0.789    0.950    27.73      0.00
 23  1.36E+04  0.168   3.98    -0.244   -0.836    25.81      0.00
 24  1.30E+04  0.176   5.03  -3.41E-3    0.891    38.97      0.00
 25  1.35E+04  0.195   3.38     0.244   -0.638    18.28      0.00
Pério
Monot  ------   ----    ---    ------   ------    -----

                ========================================
                 Bilan du Transport de la Salinité    :
                ========================================
Bilan en unité de Masse/unité de Temps : Pas de temps n° 0 - t= 0.
    (c'est-à-dire en : 1.667E-05 kg/s)
                          Entrant        Sortant        Net
Par les limites      =  1.191E+02     -1.981E+02     -7.906E+01
Mailles internes rési=  3.404E+02     -2.613E+02      7.905E+01
 -----------------------------------------------------------------
Bilan de contrôle    = -7.906E+01  (Somme totale y compris résidus)
Somme résidus intern =  6.017E+02  (Somme Val. absolue résidus)

Som val abs des résid =  6.017E+02   Plus grande composante = 1.981E+2
d'où converg int. à   :  3.037E+02 %  (d'erreur)
Écart de bilan global = -7.906E+01    (Entrées/sorties)
d'où converg. glob à  :  3.991E+01 %  (d'erreur)
```

On a alors refait ce même calcul avec un coefficient de sous-relaxation égal à 0.5. Le tableau suivant montre alors une convergence régulière.

```
Biseau Salé Henry : Maillage Fin : *Permanent* :
Diffusion = 6.6E-6 : Calcul en Charge d'eau douce
Masse volumique=1080 kg/m3 - Avec relaxation =0.50

Récapitulation Couplage : Variations à la Première Itération
             <- Moyenne/Mailles ---->  <-Valeur Maxi->
Num                v_absol  v_algèbr.                        %
Cpl Q_résid Charge Salinit Salinité   Charge Salinité Bil_Mas

 1 1.58E+5    4.66    8.76     6.37     7.38    78.41    0.00
 2 7.00E+3   0.207    4.77     2.38     1.13    41.40    0.00
 3 7.04E+3   0.234    3.63    0.336    0.967    24.99    0.00
 4 6.48E+3   0.180    2.51   -0.144    0.786    22.88    0.00
 5 5.21E+3 7.72E-2    1.39  3.54E-2    0.499    15.24    0.00
```

```
 6 3.43E+3 3.33E-2   0.755  2.26E-2    0.219     6.78    0.00
 7 2.20E+3 2.57E-2   0.361 -8.99E-3    0.123     3.64    0.00
 8 1.04E+3 1.29E-2   0.216  4.12E-3  8.09E-2     2.68    0.00
 9 5.96E+2 7.26E-3   0.142  1.49E-2  1.98E-2    0.951    0.00
10 4.03E+2 5.40E-3 7.85E-2 -1.38E-3  2.33E-2    0.515    1.00
11 2.19E+2 3.17E-3 4.92E-2 -5.21E-4  1.79E-2    0.495    0.00
12 1.29E+2 1.80E-3 3.73E-2  2.83E-3 -6.49E-3    0.197    0.00
13   86.63 1.19E-3 1.94E-2 -9.50E-5  4.91E-3    0.105    0.00
14   53.94 8.00E-4 1.38E-2 -7.30E-5  3.96E-3  9.59E-2    0.00
15   34.36 4.66E-4 1.07E-2  4.51E-4 -2.00E-3  5.78E-2    0.00
16   22.54 2.78E-4 5.61E-3  1.09E-4  1.17E-3  3.06E-2    0.00
17   15.37 1.97E-4 3.67E-3  1.33E-5  8.89E-4  2.18E-2    0.00
18   10.39 1.21E-4 2.41E-3  1.11E-4 -5.38E-4  1.34E-2    0.00
19    7.76 5.91E-5 1.41E-3  1.01E-5  2.29E-4  9.79E-3    0.00
20    6.72 4.13E-5 9.70E-4 -7.49E-5  2.17E-4  8.56E-3 7.65E-3
21    6.17 2.39E-5 1.02E-3 -1.21E-4 -1.23E-4  1.29E-2    0.00
22    6.43 2.42E-5 8.18E-4 -2.20E-5 -1.10E-4  9.15E-3    0.00
23    6.15 7.23E-6 7.81E-4  1.55E-4  3.29E-5  1.25E-2    0.00
24    6.21 2.52E-5 8.02E-4 -7.71E-6  1.14E-4  9.52E-3    0.00
25    5.95 1.34E-5 7.80E-4  4.62E-5  4.67E-5  1.04E-2    0.00
Pério
Monot    ------    ------    ------    ------      ------    ----

                ========================================
                 Bilan du Transport de la Salinité    :
                ========================================
Bilan en unité de Masse/unité de Temps : Pas de temps n° 0 - t= 0.
    (c'est à dire en : 1.667E-05 kg/s)
                          Entrant       Sortant        Net
Par les limites      =  1.827E+02     -1.827E+02     -1.985E-02
Mailles internes rési=  6.392E-01     -6.316E-01      7.652E-03
----------------------------------------------------------------
Bilan de contrôle    = -1.985E-02  (Somme totale y compris résidus)
Somme résidus intern =  1.271E+00  (Somme Val. absolue résidus)

Som val abs des résid =  1.271E+00   Plus grande composante = 1.827E+2
d'où converg. int. à  :  6.956E-01 %  (d'erreur)
Écart de bilan global = -1.985E-02    (Entrées/sorties)
d'où converg. glob à  :  1.087E-02 %  (d'erreur)
```

6.2. EXEMPLE D'APPLICATION N°2 : BISEAU SALÉ DE HENRY EN RÉGIME TRANSITOIRE

6.2.1. But de l'exemple n°2

Cet exemple classique illustre le déroulement du calcul couplé en régime **transitoire** en coupe verticale pour simuler un biseau salé.

6.2.2. Description de l'exemple n°2

Il s'agit du même système aquifère que précédemment mais les calculs sont réalisés en régime transitoire. Le transport est calculé en régime transitoire. En revanche les calculs hydrodynamiques sont réalisés en régime permanent puisque le système étant captif, les coefficients d'emmagasinement captifs sont négligeables.

La simulation est réalisée pendant 15 pas de temps de durées croissantes qui représentent une durée cumulée égale à 80 minutes.

Les paramètres hydrodynamiques, le maillage et les conditions aux limites sont identiques à ceux de l'exemple précédent. Les conditions initiales sont identiques c'est-à-dire que le système est initialement rempli d'eau douce. Un biseau salé se développe progressivement vers la gauche.

6.2.3. Paramètres du modèle

a) Description des paramètres

Couplage :

Itérations de couplage	=	15
Sous-relaxation de couplage	=	1

Hydrodynamique :

Régime	=	Permanent
Méthode	=	Gradients Conjugués : en charges d'eau douce
Nombre maximal d'itérations	=	3 à chaque pas de temps
Nombre d'itérations internes	=	50

Transport :

Régime	=	Transitoire
Méthode de calcul	=	Différences Finies ; Résolution matricielle, solveur Orthomin
Nombre maximal d'itérations	=	valeur par défaut (20 itérations).

b) Extrait du Fichier des Paramètres du modèle

On présente ci-dessous un extrait du fichier des paramètres de MARTHE

```
Biseau salé Henry : Maillage Fin : Transport Transitoire :
Diffusion = 6.6E-6 : Calcul en Charges d'eau douce

*** Contrôle de la Résolution Hydrodynamique        ***
     3 = Nombre Max d'Itér. par pas de temps Calcul suivant le Pas n°0
     0 = Nombre max d'Itér pour le pas de temps n°0 (Permanent Initial)
  5e-6 = Variation Moyenne de Charge entre 2 Itérations pour Converg.
     0 = Coefficient de Relaxation des calculs [Def=1]
     0 = Pondér. Perméa. Vois. (1=Géom 3=Amont 4=Harmo 5=Arith Def=Opt)
     0 = Rapport = (Épais. mini Dénoy) / (Épais. moy Couche) [Def=5e-3]
     0 = Solveur [0=G.Conj/Chol 3=Poly 4=Mail 5=Orthom 6=Eisen. 7=GMG]
    50 = Nombre d'Itérations Internes pour le solveur [Def=10]
     0 = Périodicité des Calculs Hydrodynamiques [Def=Tous les pas]
Perman = Régime Hydrodynamique [0=Transitoire  1=Permanent]
*** Unités des données                              ***
  SEC = Unité des Durées Hydroclimatiques  (SEC,MIN,HEU,JOU,MOI,ANN)
  MIN = Unité de Temps (des Pas de modèle) (SEC,MIN,HEU,JOU,MOI,ANN)
   cm = Unité des Coordonnées Horizontales des mailles  en m
    0 = Coefficient d'Anisotropie Verticale   Kv/Kh des Perméabilités
    0 = Coefficient d'Anisotropie Horizontale Kx/Ky des Perméabilités
    0 = Emmag. Captif lus (0=Hydrog. 1=Spécif 2=Comprs 9999=Ttes ches)
    0 = Unité des Salinités (Concentr_Dense) [Eau Douce = 0] en kg/m3
    0 = Unité des Concentrations                en kg/m3
    % = Unité des Porosités = Teneurs en Eau en [-] [1e-2 si en %]
    0 = Unité des Stocks d'eau en m3
    g = Unité des Masses en kg
    0 = Type de Perméab :(0=Def=Perméab à l'eau  ;  1=Perméab intrins)
    0 = Unité des Volumes pour Concen 'Chimiques' [Def=1/1000 = litre]
    0 = Type de Débits Mass. et d'Énergie lus : (Def=par maille ; 'm2'=par m2)
*** Couplage et Transport Densité,chaleur,concentr. ***
   15 = Nombre maximal d'Itérations pour *Couplage* Densité/Pression
    0 = Coef de Relaxation pour Couplage Densité/Pression [Def=1]
    0 = Nombre max d'Itérat *Transport* Densité/Chaleur/Conc. [Def=20]
   DF = Schéma de Transport [0=D_Finies 1=Rand_W  2=Caract=MOC  3=TVD]
```

```
6.6e-6 = Diffusion moléculaire   (m2/s)  [* = Spatialisée]
     0 = Dispersivité Longitudinale (m)  [* = Spatialisée]
     0 = Dispersivité Transversale  (m)  [* = Spatialisée]
     0 = Transport Permanent Préliminaire avant transitoire [Def=0]
     0 = Sauvegarde des positions de Particules en fin de calcul
     0 = Lecture d'un fichier de Position Initiales des Particules
     0 = Nombre de Sous-Pas pour les Particules R.W. [Def=1]
     0 = Méthode de réflection des Particules R.W. (0=Non  1=Ito)
     1 = Affichage des Bilans Massiques Cumulés (0=Oui ; -1=Non)
     1 = Solveur pour calculs de Transport : 1=Orthomin ; 2=Itérat
     0 = Omission des Termes Diago en Dif. Finies (0=Complet 1=Omiss.)
*** Densité                                         ***
 Douce = Effet de la Densité (0=Non 1=Charge 2=Pression 3=Charge Douce)
   Lin = Loi Densité(Salinité) (0=Non 1=Linéaire 3=Schlum_VDB)
     1 = Dérivée de la loi Densité/Salinité [si loi Linéaire] [Def=0.7]
     0 = Masse de chaque Particule de Salinité (si particules)
  1e-4 = Variation moy de Salinité entre 2 itérat. pour converg.
Transi = Régime Transport Salinité [0=Transitoire  1=Permanent]
     0 = Nombre maxi possible de Particules (MOC ou R.W.) [Def=30000]
     0 = Durée <==> Permanent si transport MOC ou R.W. en Perma [Def=0]
     0 = Coefficient de retard [-] Si pas ZNS [Def=1]
     0 = Temps de Demi-Dégradation (unité de temps) [Def=0]
     1 = Calcul de la Salinité (Concen_Dense) (Transport)
```

6.2.4. Résultats de la modélisation

a) Pas de temps n° 1 (t = 0.5 mn)

```
Biseau salé Henry : Maillage Fin : Transport Transitoire :
Diffusion = 6.6E-6 : Calcul en Charges d'eau douce
 ---------------------------------------------------------------
  $ Pas de Modèle n°1 Début:     0.000 Fin  :     0.500 Minute
 ---------------------------------------------------------------

Récapitulation Couplage : Variations à la Première Itération
             <- Moyenne/Mailles ---->  <-Valeur Maxi->
Num                v_absol  v_algèbr.                     %
Cpl Q_résid  Charge Salinité Salinité   Charge Salinité Bil_Mas

1      3.89  1.62E-6    0.515   -0.375  4.29E-6   24.41   0.00
2   1.46E+2  2.50E-4  1.03E-2  4.30E-3  1.63E-2    1.26   0.00
3     15.85  1.18E-5  7.50E-4  1.53E-5 -8.51E-4   0.140   0.00
4      4.33  1.77E-6  6.67E-5 -3.25E-5 -5.35E-5 1.03E-2   0.00
================================================================
               Bilan global  pas de temps No   1
```

```
==================================================================

BILAN EN UNITES DE DEBIT  Pas de temps No   1 -- T= 5.000E-01 ---

DEBITS ENTRANT /CHARG IMPOS. =  6.294E+2
DEBITS SORTANT /CHARG IMPOS. =           -1.289E+3
DEBITS ENTRANT DANS LES MAILL=  6.619E+2          (6.60E+2 IMPOS)
DEBITS SORTANT DES MAILLES   =           -1.889E+0
 -----------------------------------------------------------------
BILAN DE CONTROLE      = -3.918E-2  (Somme de tous les débits)
DEBIT RESID D'ERR      =  3.852E+0  (Somme Val absol débits résid.)
DEBIT INTERNE SIGNIFI  =  6.600E+2      0.000E+00
          Bilan global = -1.143E-2
```

```
                ========================================
                 Bilan du Transport de la Salinité    :
                ========================================
```

Les masses sont en 10^{-3} kg et les temps sont en minutes.

```
Bilan en unité de Masse/unité de Temps : Pas de temps n°1 - t= 0.5
    (c'est à dire en : 1.667E-05 kg/s)
                          ENTRANT       SORTANT        NET
PAR LES LIMITES       =  9.442E+1     -6.928E+0      8.749E+1
MAILLES INTERNES RESI =  5.182E-3     -7.198E-3     -2.016E-3
 -----------------------------------------------------------------
   STOCKAGE           =  1.001E+2     -1.257E+1      8.749E+1
BILAN DE CONTROLE     =  1.976E-3  (Somme totale y compris résidus)
SOMME RESIDUS INTERN  =  1.238E-2  (Somme Val. absolue résidus)
```

b) Pas de temps n° 15 (t = 80 mn)

```
------------------------------------------------------------------
$ Pas de Modèle n°15 Début:     70.000 Fin  :     80.000 Minutes
------------------------------------------------------------------
Récapitulation Couplage : Variations à la Première Itération
             <- Moyenne/Mailles ---->  <-Valeur Maxi->
Num                v_absol  v_algèbr.                      %
Cpl Q_résid   Charge Salinité Salinité   Charge Salinité Bil_Mas

1      4.84  1.60E-06   0.134    0.134   8.58E-6    0.67  0.00
2  1.66E+02  2.99E-03 1.84E-2 -1.20E-2   2.27E-2   0.351  0.00
3     28.79  3.63E-04 4.57E-3  2.43E-3  -2.41E-3 6.97E-2  0.00
4      9.82  6.83E-05 1.24E-3 -6.26E-4   3.93E-4 1.18E-2  0.00
5      5.78  1.56E-05 3.35E-4  1.49E-4  -7.87E-5 6.02E-3  0.00
6      4.99  4.96E-06 1.26E-4 -4.21E-5  -2.16E-5 2.82E-3  0.00
7      5.12  2.43E-06 7.61E-5  4.85E-6  -1.42E-5 2.23E-3  0.00
```

```
PERIO             0.6     0.7      0.4       0.6     1.2
MONOT -----                     ALTERN    ALTERN

=================================================================
                      Bilan global  pas de temps No  15
=================================================================

BILAN EN UNITES DE DEBIT  Pas de temps No  15 -- T= 8.000E+01 ---

DEBITS ENTRANT /CHARG IMPOS. =  2.046E+2
DEBITS SORTANT /CHARS IMPOS. =            -8.645E+2
DEBITS ENTRANT DANS LES MAILL=  6.621E+2          (6.60E+2 IMPOS)
DEBITS SORTANT DES MAILLES   =            -2.162E+0
----------------------------------------------------------------
BILAN DE CONTROLE      = -6.561E-2  (Somme de tous les débits)
DEBI RESID D'ERR       =  4.342E+0  (Somme Val absol débits résid.)
DEBIT INTERNE SIGNIFIC =  6.600E+2      0.000E+00
          BILAN GLOBAL =  2.779E-2

 d'où une converg. interne à :  5.022E-1 %  (d'erreur)
 d'où une converg. globale à :  3.214E-3 %  (d'erreur)

              ========================================
               Bilan du Transport de la Salinité    :
              ========================================
```

Les masses sont en 10^{-3} kg et les temps sont en minutes.

```
Bilan en unité de Masse/unité de Temps : Pas de temps n°15 - t= 80.
    (c'est à dire en : 1.667E-05 kg/s)
                          ENTRANT       SORTANT        NET
PAR LES LIMITES       =  3.068E+1     -2.055E+1    1.013E+1
MAILLES INTERNES RESI =  7.049E-2     -7.249E-2     -2.004E-3
-----------------------------------------------------------------
   STOCKAGE           =  1.013E+1     -2.453E-4      1.013E+1
BILAN DE CONTROLE     =  1.659E-3  (Somme totale y compris résidu)
SOMME RESIDUS INTERN  =  1.430E-1  (Somme Val. absolue résidus)

Som val abs des résid =  1.430E-1    Plus grande composante = 3.068E+1
d'où converg intern à :  4.660E-1 %  (d'erreur)
Ecart de bilan global =  1.660E-3    (Entrées/sorties)
d'où  converg. glob à :  5.409E-3 %  (d'erreur)

CUMUL DES MASSES "CONCEN_DENSE "     Cumul          Dans le pas
          ENTRANT PAR LES LIMITES =  3637.               306.8
          SORTANT PAR LES LIMITES = -1217.              -205.5
                         STOCKAGE =  2420.               101.3
```

```
STOCKAGE POSITIF (ENTRANT) =  2427.              101.3
STOCKAGE NEGATIF (SORTANT) = -6.758           -2.4527E-3
     ECART DE BILAN CUMULE =-4.1634E-2         1.6597E-2
                       (%) = 1.1447E-3         5.4091E-3
```

c) Dessins (en coupe verticale)

La figure 9 présente les isosalinités (kg/m^3) calculées à la date 3 mn (à droite, en traits interrompus) et à la date 80 mn (en trait continus). La figure 10 présente l'évolution au cours du temps, calculée à pas de temps fin, du pied de l'interface. Le pied de l'interface est défini ici comme le point ayant une salinité égale à la moyenne entre l'eau douce et l'eau salée. Une comparaison avec des calculs réalisés par Frind (1982) et Galeati *et al.* (1992) montre que les résultats de MARTHE sont tout à fait comparables ce qui constitue une vérification de cette fonctionnalité.

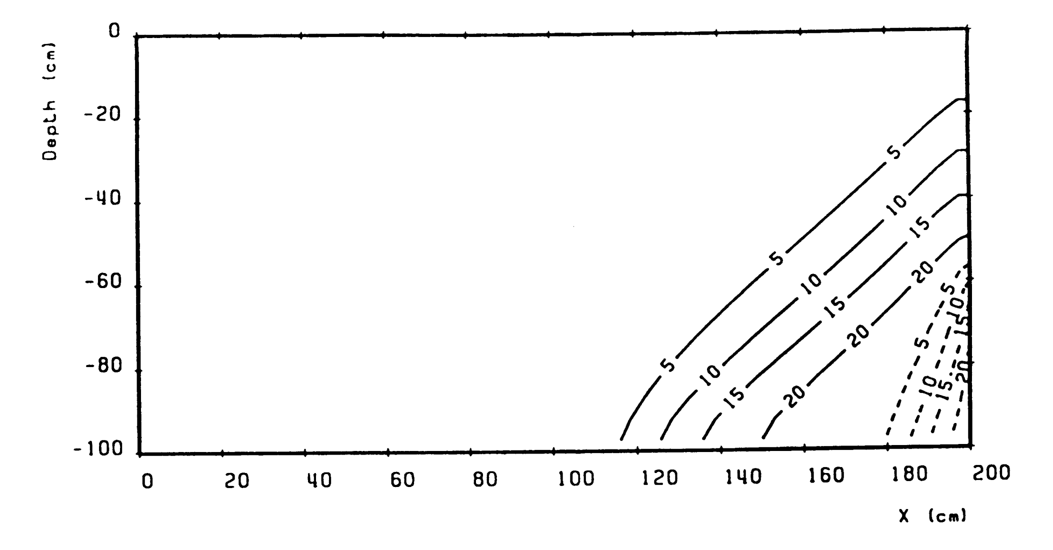


Fig. 9 - Biseau salé de Henry en régime transitoire : salinités calculées après 3 mn et après 80 mn.

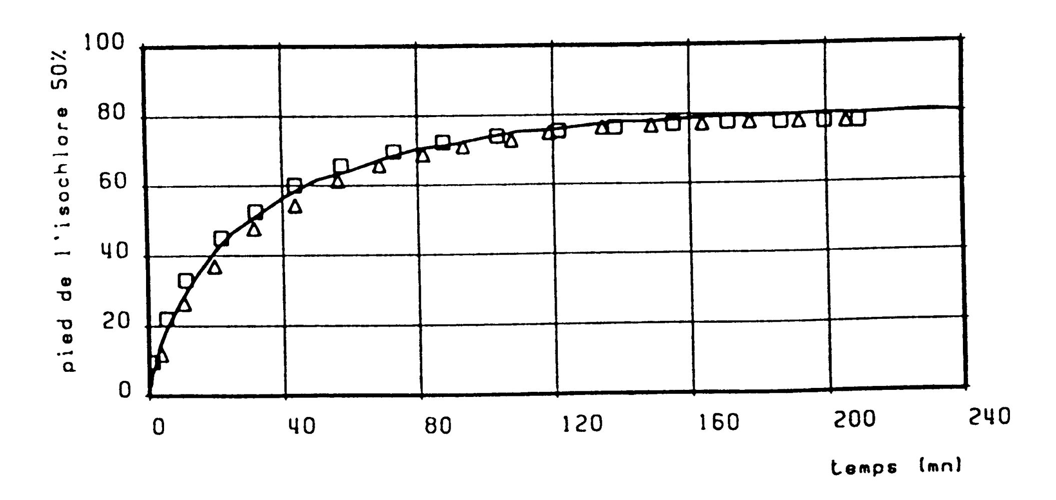


Fig. 10 - Biseau salé de Henry en régime transitoire : évolution au cours du temps du pied de l'interface. Comparaison avec des calculs réalisés par Frind (1982) [carrés] et Galeati et al. *(1992) [triangles].*

6.3. EXEMPLE D'APPLICATION N°3 : BISEAU SALÉ DE HENRY EN RÉGIME TRANSITOIRE SANS DISPERSION. MÉTHODE DES CARACTÉRISTIQUES

6.3.1. But de l'exemple n°3

Cet exemple illustre le déroulement du calcul couplé en régime **transitoire** en coupe verticale pour simuler un biseau salé abrupt sans dispersion, avec le schéma de transport par la méthode des caractéristiques (MOC).

6.3.2. Description de l'exemple n°3

Il s'agit du même système aquifère que précédemment mais sans dispersion ni diffusion. Les calculs de transport sont réalisés par la méthode des caractéristiques (MOC) au lieu de la méthode des différences finies.

6.3.3. Paramètres du modèle

Diffusion : D = 0

Dispersivités : = 0

Nombre de pas de temps : = 15, chacun découpé en 4 sous-pas de modèle)

Couplage :

Itérations de couplage : = 1 (valeur imposée pour la méthode MOC)

Sous-relaxation de couplage = 1

N.B. il n'y a qu'une itération de couplage mais les pas de calculs sont 4 fois plus petits que dans l'exemple précédent car il y a 4 sous-pas de modèle.

Hydrodynamique : idem

Transport :

Régime	=	Transitoire
Méthode de calcul	=	MOC (**M**ethod **O**f **C**haracteristics)
Masse d'une particule	=	10^{-4} kg.

6.3.4. Résultats de la modélisation

a) Déroulement des calculs

À la date 3 mn (16e pas de calcul) le champ de salinité est représenté par 2800 particules. À la date 80 mn (pas de calcul n° 60) il y a 31700 particules.

b) Dessins (en coupe verticale)

La figure 11 présente les isosalinités (kg/m^3) à la date 3 mn (à droite, en traits interrompus) et à la date 80 mn (en trait continus). On voit nettement que le biseau est abrupt, sans aucune dispersion numérique, puisque la salinité passe de 0 à 25 kg/m^3 dans la largeur d'une maille. C'est ce que permet la méthode MOC.

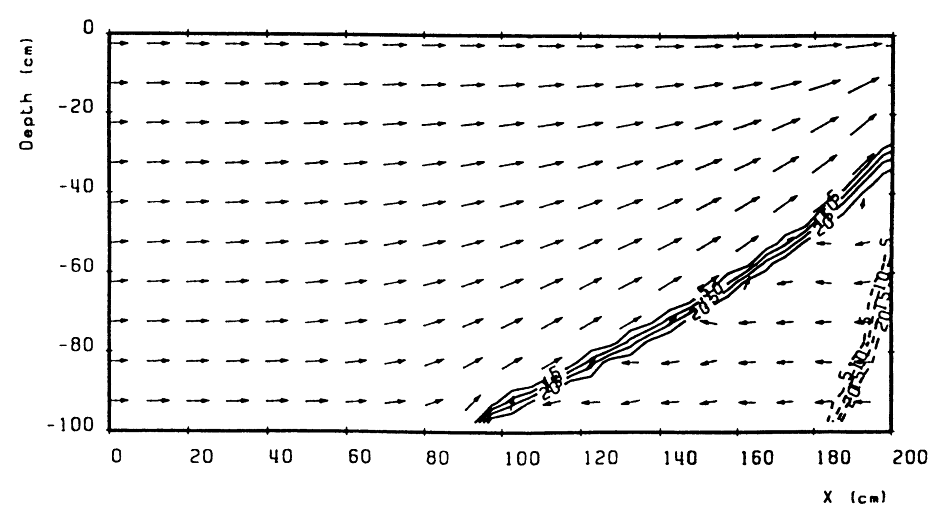


Fig. 11 - Biseau salé de Henry en régime transitoire sans dispersion : salinité calculée par la méthode MOC après 3 mn et après 80 mn.

6.3.5. Variante : Calcul du transport par la méthode TVD (Total Variation Diminishing) à limiteur de flux

Pour illustrer l'intérêt de la méthode TVD (Total Variation Diminishing) par le calcul du transport, le même calcul a été réalisé avec cette méthode. Pour ce calcul on a choisi de découper les 15 pas de temps de modèle en 20 sous-pas. On a également pris un maillage régulier avec 40 colonnes égales de 5 cm (au lieu de 41 colonnes avec la 41e colonne de 0.1 cm). En effet, la méthode TVD serait pénalisée par les très petites mailles.

Pour le couplage on a choisi 10 itérations de couplage avec un coefficient de sous-relaxation égal à 0.7

La figure 12 montre la position du biseau après 3 mn et après 80 mn. Les isovaleurs tracées sont les isovaleurs de salinité 5, 10, 15 et 20 kg/m^3. Cette figure montre des résultats proches de ceux obtenus avec la méthode MOC, avec un front abrupt bien représenté par la méthode TVD qui génère extrêmement peu de dispersion numérique.

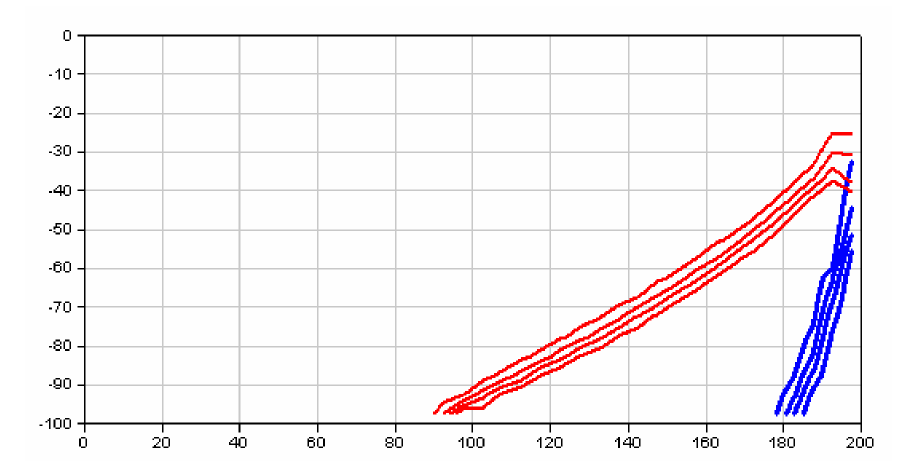


Fig. 12 - Biseau salé de Henry en régime transitoire sans dispersion : salinité calculée par la méthode TVD après 3 mn et après 80 mn.

6.4. EXEMPLE D'APPLICATION N°4 : ÉCOULEMENT PLAN MONOCOUCHE EN PRÉSENCE D'UN CHENAL (RÉGIME TRANSITOIRE)

6.4.1. But de l'exemple n°4

Cet exemple montre qu'il est possible de faire un calcul en monocouche horizontal, avec prise en compte des effets de densité, à condition que le système présente des variations latérales d'altitude (Toit, Substratum). Cet exemple est traité en régime transitoire.

6.4.2. Description de l'exemple n°4

Il s'agit d'un système aquifère plan de 200 cm de long sur 100 cm de large et d'épaisseur 100 cm. À mi-ordonnée du système, un chenal de 10 cm de large parcourt le système d'ouest en est sur toute la largeur. Le substratum est alors à une profondeur de 200 cm au lieu de 100 cm. Un débit d'eau salée arrive par la gauche (sur toute la largeur). Ce débit est égal à 260 10^{-7} m^3/s par m d'ordonnée et par mètre d'épaisseur d'aquifère, soit un débit total de 286 10^{-7} m^3/s. Les calculs sont réalisés en régime transitoire : le transport est calculé en régime transitoire mais les calculs hydrodynamiques sont réalisés en régime permanent.

La simulation est réalisée pendant 15 pas de temps de durées croissantes qui représentent une durée cumulée égale à 80 minutes.

Les paramètres hydrodynamiques, et le maillage sont identiques à ceux de l'exemple 1 mais l'aquifère est horizontal au lieu d'être en coupe verticale. La condition limite est (aval) est à charge imposée. Sa salinité extérieure est égale à 0 mais cette salinité ne joue pas. Le système est initialement rempli d'eau douce (salinité = 0). L'eau salée injectée à gauche se propage et, étant plus dense s'accumule dans le chenal.

6.4.3. Paramètres du modèle

a) Description des paramètres

Couplage :

Itérations de couplage	=	15
Sous-relaxation de couplage	=	1

Hydrodynamique :

Régime	=	Permanent
Méthode	=	Gradients Conjugués : en charges d'eau douce
Nombre maximal d'itérations	=	3 à chaque pas de temps
Nombre d'itérations internes	=	50

Transport :

Régime	=	Transitoire
Méthode de calcul	=	Différences Finies ;
		Résolution matricielle, solveur Orthomin
Nombre maximal d'itérations	=	Valeur par défaut (20 itérations)

b) Extrait du Fichier des Paramètres du modèle

On présente ci-dessous un extrait du fichier des paramètres de MARTHE

```
Écoulement Monocouche Horizontal : Transport Transitoire :
Diffusion = 6.6E-6 : Calcul en Charges d'eau douce
 *** Point origine et état des données              ***
 0 = Référence des Charges   (Charges modèle=Charges lues + Refer.)
 0 = Référence du Substratum (Substr. modèle=Substr. lus  + Refer.)
 0 = Épaisseur Tranche de coupe (Unité de Coord Mailles ou Degrés)
 0 = État init lu [0=Charg 1=Press 2=Satur 3=NAQ 4=S_Liq 5=S_NAQ]
 0 = Pesanteur : 0=Oz->Bas ; 1=Oy->Bas (Coupe Vertic) ; 2=Ox Droite

 *** Initialisation avant calculs                    ***
  /POROSITE  /SEMIS N: =35
  /H_TOPOGR  /SEMIS N: =0
  /H_SUBSTRAT/SEMIS N: =-100
  /H_SUBSTRAT/MAILL C=      *L= 10:11 P=      1V=   -200;
  /CHARGE    /SEMIS N: =0
  /SALINITE  /SEMIS N: =0
  /SALIN_EXT /MAILL C=      1L=      *P=      1V=     25;
  /SALIN_EXT /MAILL C=     41L=      *P=      1V=      0;
  /CHARGE    /SEMIS N: =0
  /DEBIT     /MAILL C=      1L=      *P=      1V=     13;
  /DEBIT     /MAILL C=      1L= 10:11 P=      1V=     26;
  /DEBIT     /MAILL C=     41L=      *P=      1V=   9999;
```

6.4.4. Résultats de la modélisation

Les figures 13 et 14 présentent les iso-salinité (kg/m^3) à la date 80 mn avec et sans effets de densité. On voit que sous l'effet de la densité l'eau salée, plus dense s'accumule dans le chenal où elle se déplace en priorité. On observe donc une avancée de la salinité nettement plus rapide dans le chenal.

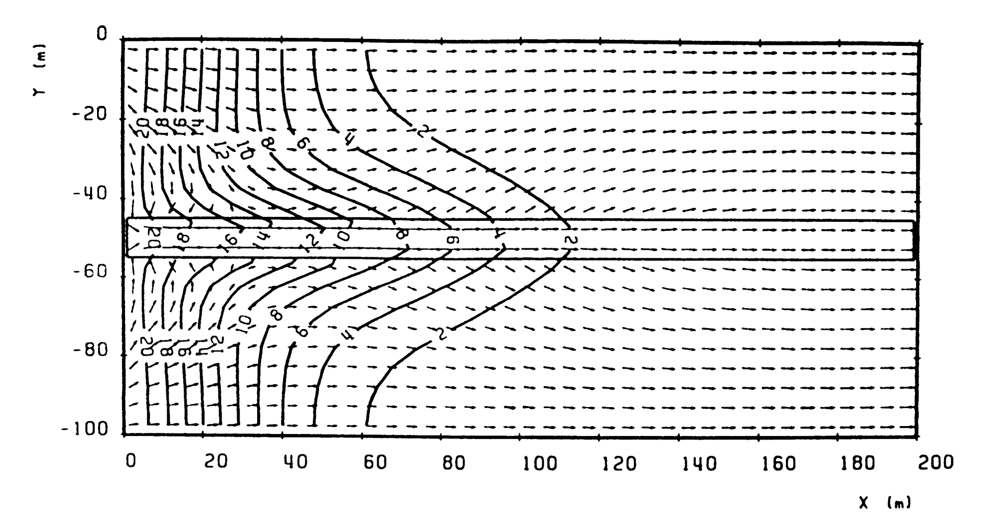


Fig. 13 - Écoulement monocouche horizontal en présence d'un chenal. Salinité calculée après 80 mn avec effets de densité.

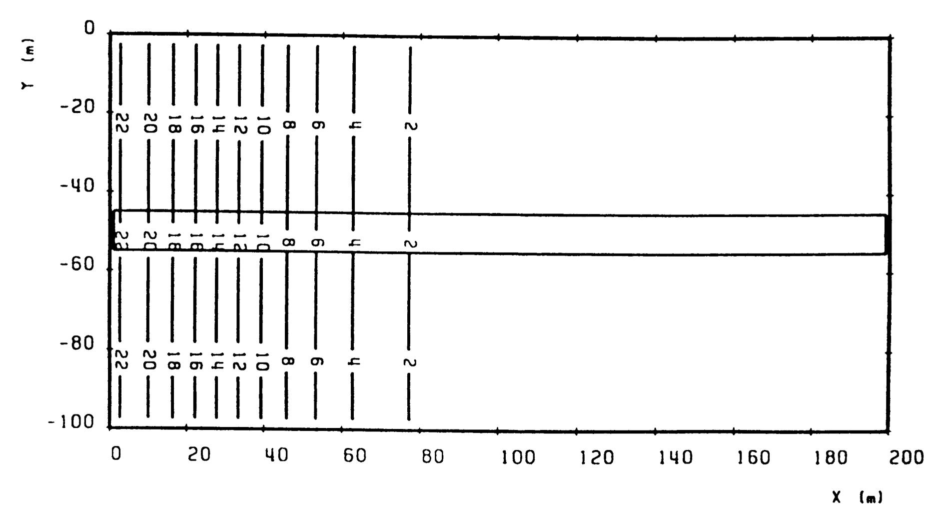


Fig. 14 - Écoulement monocouche horizontal en présence d'un chenal. Salinité calculée sans effets de densité.

6.5. EXEMPLE D'APPLICATION N°5 : RETOUR À L'ÉQUILIBRE DANS UN TUBE EN U (EN RÉGIME TRANSITOIRE)

6.5.1. But de l'exemple n°5

Cet exemple monodimensionnel compare les résultats du modèle MARTHE en régime transitoire à une solution analytique sans diffusion (Henry, 1962) citée par Pinder et Cooper (1970).

6.5.2. Description de l'exemple n°5

Il s'agit d'un tube en U vertical, dont on ne modélise qu'une branche de 100 m de haut (disons la branche de gauche). La branche de droite est remplie d'eau salée jusqu'à son niveau supérieur qui est à l'altitude 0 où la charge est imposée. La branche de gauche, celle qui est calculée, présente initialement une surcharge d'eau douce **H0** de +2 m. Le tube est en équilibre hydrostatique avec donc une interface entre l'eau douce et l'eau salée située à la cote **ZI**. À l'instant initial la surcharge d'eau douce baisse de **DH** = 1.5 m. Un nouvel équilibre est alors progressivement atteint.

Les *paramètres hydrodynamiques* sont les suivants :

Perméabilité	: K	=	1.0 10^{-3} m/s
Porosité	: ω	=	10 %
Diffusion	: D	=	0
Dispersivités	:	=	0
Hauteur de la colonne	:	=	100 m

Maillage :

Il est composé de 102 mailles de 1 m de haut (excepté les 2 mailles de chaque extrémité qui ont pour dimension respectivement 0.1 m et 0.95 m).

Loi de densité : Loi linéaire ρ = 1000 + 1 . C

Conditions aux limites :

Limite Haut : Salinité extérieure = 0, Charge imposée = 0.5 m

Limite Bas : Salinité extérieure = 25 kg/m^3, Charge imposée = 0 m

Initialement l'altitude de l'interface **ZI0** est définie par :

$ZI0 = - H0 / (d_S - 1)$ avec $d_S = 1.025$ soit ZI = -80 m.

Puis progressivement l'interface tend vers la nouvelle valeur :

$ZI = - (H0 - DH) / (d_S - 1)$ soit ZI = -20 m

Solution analytique :

On peut montrer facilement, en écrivant l'équation de continuité du fluide que les charges réelles sont données par les expressions suivantes :

L'altitude **ZI** de l'interface est donnée par :

$$ZI = ZI0 + DH \cdot \frac{1}{ds-1} \cdot \left[1 - \exp\left(-t/CT\right)\right] \;=\; -\frac{H0 - DH}{ds-1} \cdot \left[1 - \exp\left(-t/CT\right)\right]$$

$$\text{avec : } CT = \omega \cdot \frac{L}{K} \cdot \frac{1}{ds-1}$$

L'expression du débit **Q** (obtenue à partir de la dérivée de ZI par rapport au temps) s'écrit :

$$Q = K \cdot \frac{DH}{L} \cdot \exp(-t/CT)$$

La charge **H** dans la zone où l'eau est douce est donnée par :

$$H = H0 - DH - z \cdot \frac{DH}{L} \cdot \exp(-t/CT)$$

La charge **H** dans la zone où l'eau est salée est donnée par:

$$H \cdot ds = -(z + L) \cdot \frac{DH}{L} \cdot \exp(-t/CT)$$

Conditions initiales :

Les salinités initiales ont été fixées d'après la position de l'interface.

Initialement le système est en équilibre hydrostatique avec la surcharge d'eau douce **H0**.

La charge est donc égale à **H0** jusqu'à l'interface (c'est-à-dire jusqu'à la profondeur -80 m). En-dessous de cette profondeur la charge (réelle) est constante et égale à 0.

Pour la modélisation, on a décalé les altitudes et les charges de -2 m. On obtient alors une charge constante égale à 0 m au-dessus de l'interface et une charge constante, égale à -2 m, en dessous de l'interface. À l'instant initial la surcharge est diminuée brutalement de DH soit une charge H = -DH = -1.5 dans la seule maille supérieure ce qui provoque un choc brutal. Les calculs sont réalisés en régime transitoire : transport en régime transitoire et calculs hydrodynamiques en régime permanent. La durée totale de simulation a été choisie égale à 5 fois la constante de temps **CT**. Cette durée a été découpée en 62 pas de temps de durées croissantes de 6667 s à 423000 s.

6.5.3. Paramètres du modèle

Trois modélisations ont été réalisées : une modélisation en Différences Finies, une modélisation par la méthode des caractéristiques (MOC) adaptée à une interface abrupte et une modélisation par la méthode TVD adapté aux systèmes peu dispersifs.

Hydrodynamique :

Régime	=	Permanent
Méthode	=	Gradients Conjugués en charge d'eau douce
Nombre maximal d'itérations	=	3 à chaque pas de temps
Nombre d'itérations internes	=	50

a) Description des paramètres : Différences Finies

Couplage :

Itérations de couplage	=	9
Sous-relaxation de couplage	=	0.6

Transport :

Régime	=	Transitoire
Nombre de sous pas de calcul	=	0
Méthode de calcul	=	Différences Finies ;
		Résolution matricielle, solveur Orthomin
Nombre maximal d'itérations	=	défaut (20 itérations)

b) Description des paramètres : Méthode MOC

Couplage :

Itérations de couplage	=	1
Sous-relaxation de couplage	=	1

Transport :

Régime	=	Transitoire
Nombre de sous pas de calcul	=	4
Méthode	=	MOC
Masse d'une particule	=	0.003 kg

c) Description des paramètres : Méthode TVD

Couplage :

Itérations de couplage = 5

Sous-relaxation de couplage = 1

Transport :

Régime = Transitoire

Nombre de sous pas de calcul = 4

Méthode de calcul = TVD ;
Résolution matricielle, solveur Orthomin

Nombre maximal d'itérations = Valeur par défaut (20 itérations)

6.5.4. Résultats de la modélisation

Les figures 15 et 16 présentent les résultats des calculs obtenus avec la méthode des Différences Finies. La figure 15 présente l'évolution de la position de l'interface sur 3 modules logarithmiques du temps. La figure 16 présente l'évolution du débit d'eau salée entrant en bas de la colonne et d'eau douce sortant par le haut. La comparaison avec la solution analytique de Henry (1962) (symboles) montre que la simulation avec le modèle MARTHE (trait continu) est extrêmement précise. La comparaison des profils de salinité (non représentée) montre une assez forte dispersion numérique, ce qui est inévitable avec le schéma de transport en différences finies amont (schéma « donnor cell »). En effet le nombre de Péclet est infini puisque la dispersion et la dispersivités sont égales à 0.

Les figures 17 et 18 présentent les résultats des calculs obtenus avec la méthode MOC. La figure 17 présente l'évolution des charges à la profondeur 38.5 m. La figure 18 présente l'évolution de la salinité au même point. La comparaison avec la solution analytique (trait continu) montre que la simulation avec le modèle MARTHE (trait interrompu) est extrêmement précise et ne présente absolument aucune dispersion numérique.

Dans cet exemple, les calculs par la méthode MOC débutent avec 17000 particules et se terminent avec 66000 particules. Si le nombre de particules est significativement réduit la simulation fait apparaître beaucoup plus de fluctuations autour de la solution analytique.

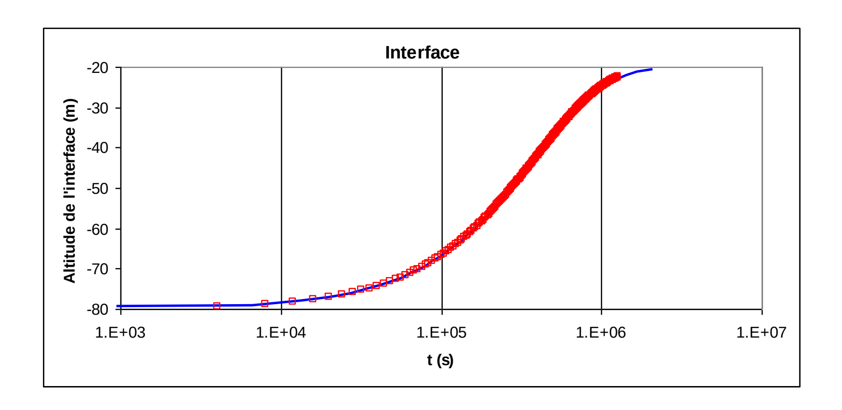


Fig. 15 - Retour à l'équilibre dans un tube en U : évolution de la position de l'interface (Symboles = solution analytique ; Trait continu = MARTHE Différences Finies).

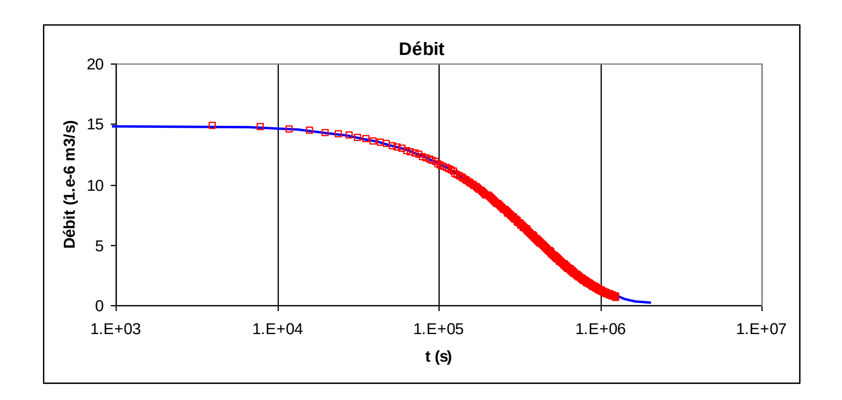


Fig. 16 - Retour à l'équilibre dans un tube en U : évolution du débit entrant en bas de la colonne et sortant par le haut. (Symboles= solution analytique ; Trait continu = MARTHE Différences Finies).

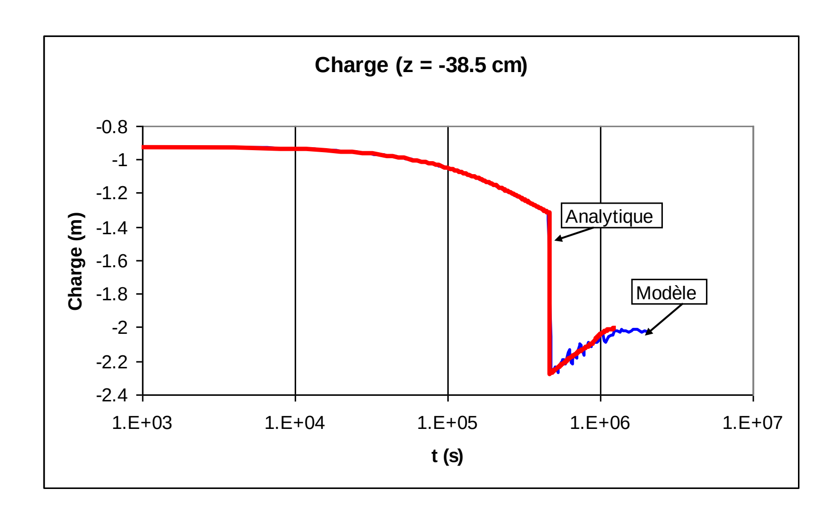


Fig. 17 - Retour à l'équilibre dans un tube en U : évolution de la charge à 38.5 m de profondeur. (Trait continu = Solution analytique ; - - - = MARTHE Méthode MOC).

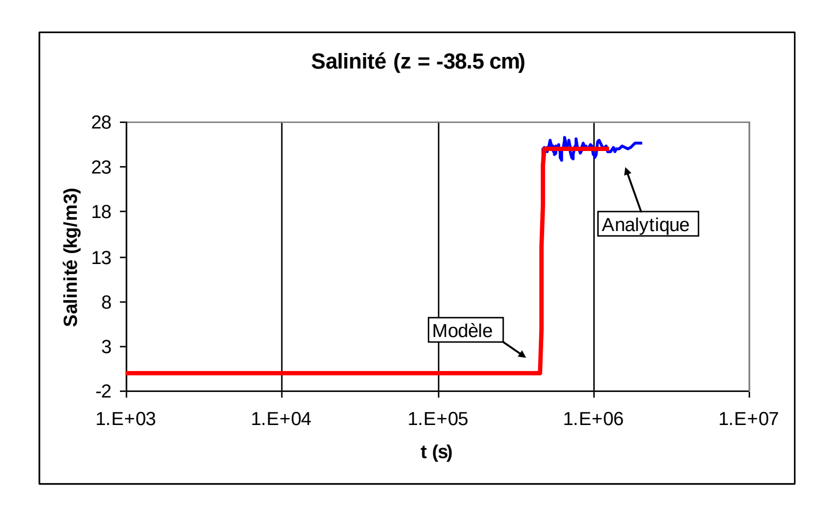


Fig. 18 - Retour à l'équilibre dans un tube en U : évolution de la salinité à 38.5 m de profondeur (Trait continu = Solution analytique ; - - - = MARTHE Méthode MOC).

Les figures 19 et 20 présentent les résultats des calculs obtenus avec la méthode TVD. La figure 19 présente l'évolution des charges à la profondeur 38.5 m. La figure 20 présente l'évolution de la salinité au même point. La comparaison avec la solution analytique (trait continu) montre une simulation précise avec le modèle MARTHE par la méthode TVD (trait interrompu), avec peu dispersion numérique, malgré un nombre de Péclet infini.

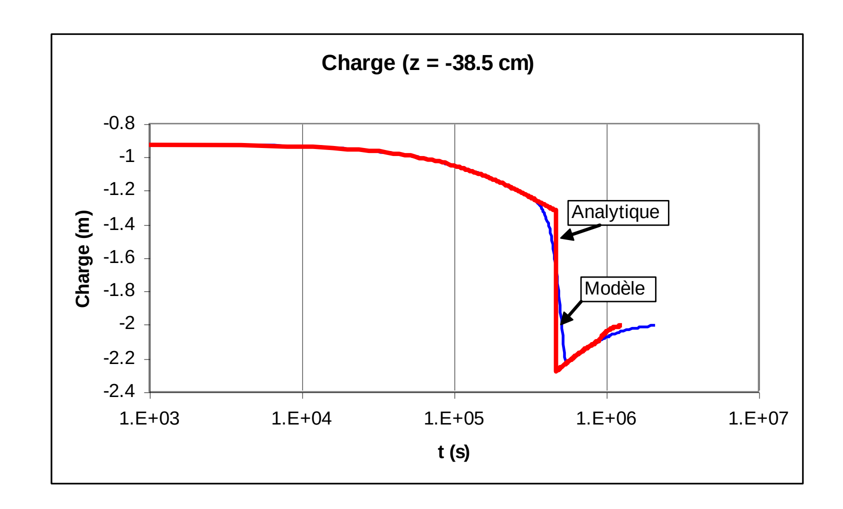


Fig. 19 - Retour à l'équilibre dans un tube en U : évolution de la charge à 38.5 m de profondeur. (Trait continu = Solution analytique ; - - - = MARTHE Méthode TVD).

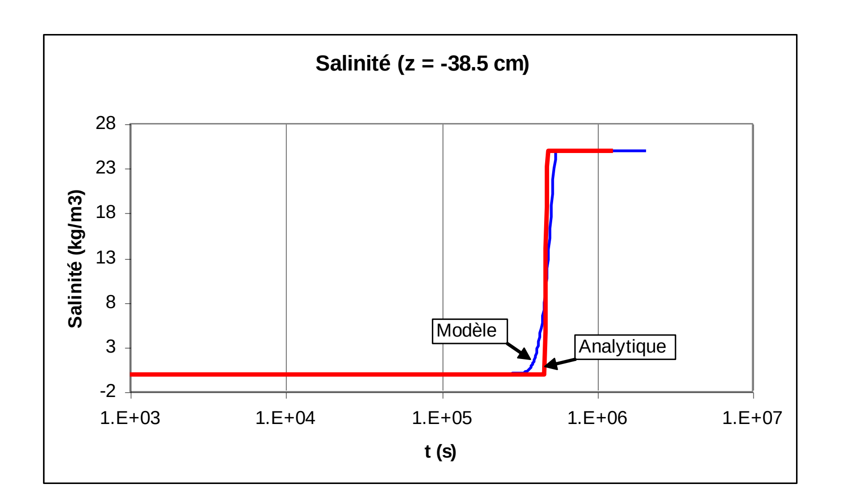


Fig. 20 - Retour à l'équilibre dans un tube en U : évolution de la salinité à 38.5 m de profondeur (Trait continu = Solution analytique ; - - - = MARTHE Méthode TVD).

6.6. EXEMPLE D'APPLICATION N°6 : DÔME DE SEL (TEST INTERNATIONAL HYDROCOIN)

6.6.1. But de l'exemple n°6

Cet exemple en coupe verticale présente la modélisation des écoulements au-dessus d'un dôme de sel générant de très fortes densités donc un couplage très fort. Cet exemple fait partie du test international HYDROCOIN. Il est inspiré du site de Gorleben situé en Allemagne. Les résultats du modèle MARTHE dans ce cas complexe sont comparés à ceux obtenus par d'autres laboratoires étrangers.

6.6.2. Description de l'exemple n°6

Il s'agit d'un système aquifère, de 900 m de large sur 300 m de profondeur, modélisé en coupe verticale. Au fond du système, sur le tiers central (x=300 à x=600), se trouve un dôme de sel qui engendre une saumure sursaturée de masse volumique imposée à 1200 kg/m^3 (densité 1.2). Les limites ouest et est son imperméables. Sur la limite supérieure, de l'eau douce rentre sous l'effet d'une pression imposée variant linéairement de 10^{+5} Pa (10.19 m d'eau) à l'ouest jusqu'à 0 Pa à l'est. Sous l'effet de l'écoulement, le fluide dense remonte, et si la diffusion est forte on observe des courants de convection. Deux variantes sont simulées : une variante avec une forte diffusion et une variante avec une faible dispersion.

Les paramètres *hydrodynamiques et hydrodispersifs* sont les suivants :

Perméabilité	: K	=	9.81 10^{-6} m/s
Porosité	: ω	=	20 %

Exemple avec une forte diffusion :

Diffusion	: D	=	5 10^{-6} m^2/s
	soit D.ω	=	10^{-6} m^2/s
Dispersivités	:	=	0

Exemple avec une faible dispersion :

Diffusion	: D	=	0
Dispersivités	: α_L	=	20 m ; α_T = 2 m

Pas d'entraînement de la salinité par convection sur la limite du bas.

Maillage :

Il est composé de 45 lignes de 45 colonnes. Les colonnes ont toutes 20 m de dimension. Les lignes ont des hauteurs variables croissantes de 1 m en haut et en bas, jusqu'à 8 m pour les 27 lignes centrales.

Loi de densité : Loi linéaire ρ = 1000 + 1 . C

Salinité maximale : 200 kg/m^3 soit une densité de 1.2

Conditions aux limites :

Limite Haut : Salinité extérieure = 0

: Salinité : 0 imposée de x = 0 m à x = 200 m

: Pression imposée : 10^{+5} Pa à l'Ouest -> 0 Pa à l'est.

Limite Bas : Charges : limite étanche

: Salinité imposée : 200 kg/m^3 de x = 300 à x = 600

: Pour le schéma avec faible dispersion on a divisé par 100 les perméabilités dans la zone à salinité imposée pour ne pas avoir d'entraînement par convection.

6.6.3. Paramètres du modèle

Couplage :

- Forte diffusion :

Itérations de couplage = 240

Sous-relaxation de couplage = 0.1

Méthode de résolution = En charges réelles

- Faible dispersion :

Itérations de couplage = 160

Sous-relaxation de couplage = 0.02

Méthode de résolution = En charges d'eau douce

N.B. On remarque un nombre d'itérations de couplage beaucoup grands que dans les exemples précédents : d'une part puisque le calcul est en régime permanent mais surtout parce que les densités de 1.2 induisent un très fort couplage, ce qui n'était pas le cas avec les densités de 1.025 pour l'eau de mer des autres exemples.

Hydrodynamique :

Régime = Permanent

Méthode = Gradients Conjugués

Nombre maximal d'itérations = 3 à chaque pas de temps

Nombre d'itérations internes = 50

Transport :

Régime	=	Permanent
Méthode de calcul	=	Différences Finies ; Résolution matricielle, solveur Orthomin
Nombre maximal d'itérations	=	défaut (60 itérations)

6.6.4. Résultats de la modélisation

- Forte diffusion :

Les calculs en régime permanent convergent parfaitement; le flux massique sortant du système est égal à 4.66 10^{-4} kg/s par m de tranche de coupe.

- Faible dispersion :

Les calculs en régime permanent convergent un peu plus difficilement. Avec les paramètres choisis le bilan global est obtenu à 1.1 % près. Le flux massique sortant est égal à 5.43 10^{-4} kg/s par m de tranche de coupe.

Les figures 21 et 22 présentent le profil de salinité calculée. Les isovaleurs sont normées par rapport à la salinité maximale (c'est-à-dire que l'isovaleur 0.2 correspond à une salinité de 40 kg/m^3). La figure 21 correspond au schéma avec une forte diffusion : Les salinités calculées avec le code MARTHE (trait continu) sont comparées à celles obtenues (traits interrompus) par Herbert (1988) avec une méthode totalement différente. Il apparaît que la correspondance entre les deux simulations est très bonne.

Cette figure montre que l'écoulement fait apparaître deux cellules de convection tournant en sens opposés.

La figure 22 correspond au schéma avec une faible dispersion. Les salinités calculées avec le code MARTHE (trait continu), sont comparées à celles obtenues (traits interrompus) par Oldenburg et Pruess (1995) en régime transitoire avec le modèle TOUGH2. On note une bonne correspondance entre les deux simulations. Cet écoulement, avec une faible dispersion ne fait pas apparaître de cellules de convection.

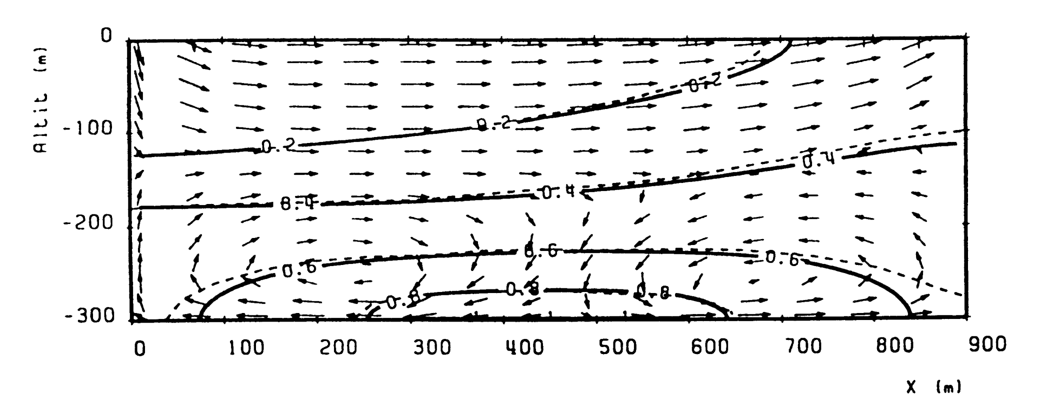


Fig. 21 - Dôme de sel avec forte diffusion : les salinités calculées avec le code MARTHE (trait continu) sont comparées à celles obtenues (traits interrompus) par Herbert (1988).

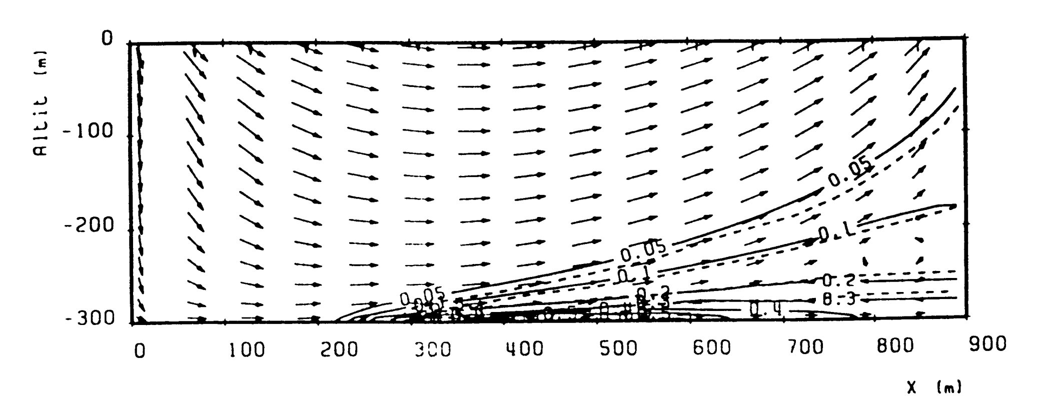


Fig. 22 - Dôme de sel avec faible dispersion : les salinités calculées avec le code MARTHE (trait continu) sont comparées à celles obtenues (traits interrompus) par Oldenburg et Pruess (1995).

6.7. EXEMPLE D'APPLICATION N°7 : FLUIDE LÉGER EN ZONE NON SATURÉE

6.7.1. But de l'exemple n°7

Cet exemple en coupe verticale présente la modélisation d'un épandage d'un fluide **plus léger** que l'eau à la surface d'un sol Non Saturé situé au-dessus d'une nappe souterraine. L'intérêt de cet exemple est de montrer comment modéliser un fluide léger en Zone Non Saturée (ZNS). Cet exemple ressemble à un écoulement diphasique, mais il en diffère d'une part puisque l'eau et le fluide plus léger ont les mêmes perméabilités, d'autre part parce qu'il n'y a pas de « succion » entre les 2 fluides (pas de différence de pression).

6.7.2. Description de l'exemple n°7

Il s'agit d'un système aquifère peu profond, de 50 m de large avec une zone non saturée de 0.5 à 0.8 m d'épaisseur. Le système est modélisé en coupe verticale sur une épaisseur de 1 m. À 18 m en aval de la limite ouest, se produit un épandage d'un fluide de densité 0.8 (masse volumique 800 kg/m^3). Sous l'effet de la succion de la ZNS ce fluide est entraîné vers le bas ou il tend à flotter à la surface de la zone saturée, c'est-à-dire à la surface de la nappe.

Les paramètres *hydrodynamiques et hydrodispersifs* sont les suivants :

Perméabilité à saturation	: K = 10^{-2} m/s
Diffusion	: D = 0
Dispersivités	: = 0

Lois en Zone Non Saturée :

Porosité	: ω = 25 %
Teneur en eau résiduelle	: θ_r = 5 %
Loi de perméabilité	: K(saturation) de type « Puissance » ; exposant = 4
Loi de rétention	: Loi Homographique; exposant = 0.25
	: Succion à 1/2 saturation = 0.3 m.

Maillage :

C'est un maillage carré de 11 lignes de 0.1 m de haut et 21 colonnes de 2.5 m de large. Les altitudes vont de 0 m à -1 m.

Loi de densité	*:* Loi linéaire ρ = 1000 - 1 . C
Salinité injectée	: 200 kg/m^3 soit une densité de 0.8

Conditions aux limites :

Limite Gauche	: Charge imposée à -0.5 m (amont)
Limite Droite	: Charge imposée à -0.8 m (aval) : altitudes -0.8 m à -1 m
	: Surface de suintement au-dessus.
Limite Bas	: Limite étanche
Limite Haut	: Initialement étanche
	: Après l'initialisation en régime permanent, on impose une charge égale à -0.55 m et une salinité extérieure de 200 kg/m^3 donc une densité de 0.8.

Conditions initiales :

Le système a été initialisé en régime permanent (avant injection de fluide). La limite de saturation est alors située entre -0.5 m et -0.8 m de profondeur.

On a alors fixé la succion à -0.55 m dans la maille d'injection ce qui correspond à un débit injecté (variable au cours du temps) de l'ordre de 2 10^{-5} m^3/s (par mètre de coupe verticale). Le débit amont est de l'ordre 2.4 10^{-5} m^3/s.

Les calculs sont réalisés en régime transitoire : transport en régime transitoire et calculs hydrodynamiques en régime permanent. La simulation est réalisée sur une période totale de 5000 mn (3.5 jours environ). Comme les calculs sont réalisés en Zone Non Saturée, les pas de temps de calcul du code MARTHE sont calculés automatiquement pour assurer une convergence hydrodynamique optimale. Le pas de temps est contraint à être compris entre 0.05 mn et 1 mn.

6.7.3. Paramètres du modèle

Couplage :

Itérations de couplage	=	1
Sous-relaxation de couplage	=	1
Méthode de résolution	=	En charges d'eau douce

Hydrodynamique :

Régime	=	Transitoire
Méthode	=	Gradients Conjugués
Nombre maximal d'itérations	:	(50 itérations internes)
Permanent pour l'état Initial	=	20 itérations
Régime transitoire suivant	=	3 itérations

Transport :

Régime	=	Transitoire
Méthode de calcul	=	Méthode MOC
Masse d'une particule	=	0.01 kg

6.7.4. Résultats de la modélisation

La figure 23 présente les isovaleurs de la salinité calculée après 5000 mn. Les isovaleurs sont exprimées en % de la salinité maximale (c'est-à-dire que l'isovaleur 50 % correspond à une salinité de 100 kg/m^3, densité = 0.9). Il apparaît que l'interface est abrupte, comme le permet la méthode choisie. On voit bien que le fluide léger s'écoule en flottant à la surface de la limite de saturation en eau de la nappe.

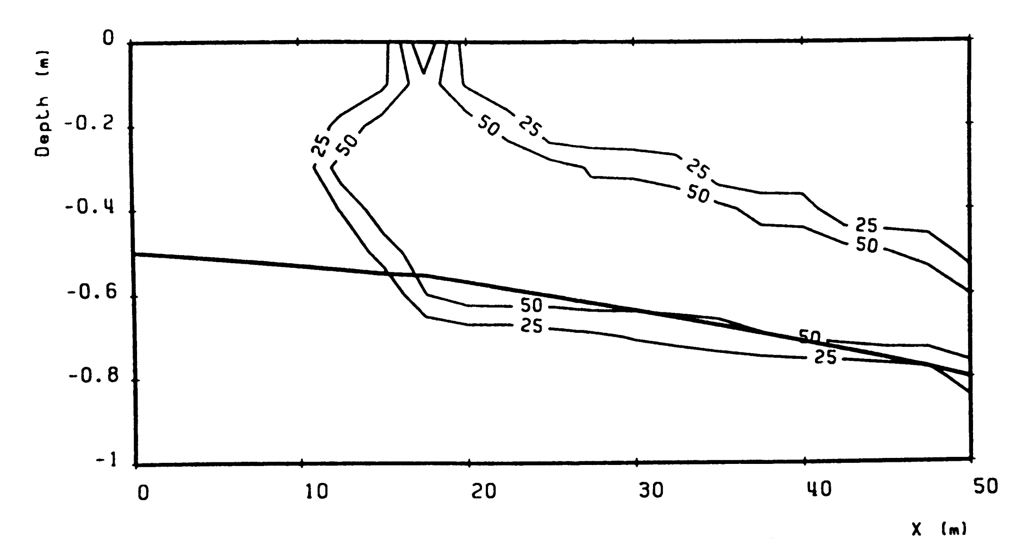


Fig. 23 - Épandage d'un fluide léger et percolation à travers la Zone Non Saturée. Salinités calculées après 5000 mn.

6.8. EXEMPLE D'APPLICATION N°8 : PRISE EN COMPTE DES EFFETS DE LA DENSITÉ SANS CALCUL DE LA SALINITÉ

6.8.1. But de l'exemple n°8

Cet exemple en coupe verticale montre comment on peut prendre en compte les effets d'un champ de salinité connu, sans calcul de ce champ. Dans un schéma sans prise en compte du champ de salinité il n'est pas possible avec le modèle MARTHE de fixer dans des conditions aux limites en **pression**. Des conditions aux limites en pression pourraient cependant être utiles, par exemple dans un système de galeries à la pression atmosphérique. Un calcul hydrodynamique avec prise en compte des effets de la densité, sans calcul de la salinité, peut être une manière détournée d'introduire des conditions initiales, ou des conditions limites, en pression.

6.8.2. Description de l'exemple n°8

Il s'agit du même système en coupe que dans l'exemple n°1 : le biseau salé de Henry en régime permanent. La salinité est supposée connue. On lui donne une répartition approximation triangulaire, un peu similaire à un biseau salée. Pour illustrer l'utilisation d'une autre loi, c'est la relation de Schlumberger qui a été choisie pour relier la densité à la salinité.

Les paramètres *hydrodynamiques* sont les suivants :

Loi de densité : Relation de Schlumberger (Vandenbeusch 1976 révisée)

Conditions aux limites :

Limite ouest : Débit d'eau douce = 33 10^{-7} m^3/s sur chaque maille

Limite est : Charge imposée = 0 sur chaque maille

État initial :

Salinité : 0 partout sauf 30 kg/m^3 dans un triangle situé à l'est

Hydrodynamique : Charges = 0 partout.

6.8.3. Paramètres du modèle

a) Description des paramètres

Couplage : pas de couplage

Hydrodynamique : permanent (identique à l'exemple n°1)

Transport : pas de transport

b) Extrait du Fichier des Paramètres du modèle

On présente ci-dessous un extrait du fichier des paramètres de MARTHE

```
Prise en compte des Effets de la Densité sans calcul de la salinité
*** Couplage et Transport Densité,chaleur,concentr. ***
  0 = Nombre maximal d'Itérations pour *Couplage* Densité/Pression
  0 = Coef de Relaxation pour Couplage Densité/Pression [Def=1]
  0 = Nombre maxi d'Itérat *Transport* Densité/Chaleur/Concen [Def=20]
 DF = Schéma de Transport [0=D_Finies 1=Rand_W  2=Caract=MOC  3=TVD]
  0 = Diffusion moléculaire   (m2/s)  [* = Spatialisée]
  0 = Dispersivité Longitudinale (m)  [* = Spatialisée]
  0 = Dispersivité Transversale  (m)  [* = Spatialisée]
  0 = Transport Permanent Préliminaire avant transitoire [Def=0]
  0 = Édition des positions de Particules en fin de calcul (-1=Binai.)
  0 = Lecture d'un fichier de Position Initiales des Particules
  0 = Nombre de Sous-Pas pour les Particules R.W. [Def=1]
  0 = Méthode de réflection des Particules R.W. (0=Non  1=Ito)
  0 = Affichage des Bilans Massiques Cumulés (0=Oui ; -1=Non)
  0 = Solveur pour calculs du Transport : 1=ORTHOMIN ;2=Itérat [Def=1]
  0 = Omission des Termes Diago en Diff. Finies (0=Complet 1=Omission)
  0 = Concent/Tempér Non limitées par mini/maxi [Def=Limit. 1=non Lim]
  0 = Nombre Maxi d'Itérat pour Sorption Langmuir/Freundlich [Def=20]
  0 = Coef de Relaxation pour Sorption Langmuir/Freundlich [Def=1]
  0 = Schéma TVD Complet [0=Allégé = Standard (Rapide) ; 1=Complet]
```

```
  0 = Rapport Dispersiv. Transvers. Vertic. / Dispersiv Transv. Horiz.
*** Densité                                         ***
  Douce = Effet de la Densité (0=Non 1=Charge 2=Pression 3=Charge Douce)
 Schlum = Loi Densité(Salinité) (0=Non 1=Linéaire 3=Schlum_VDB)
      0 = Dérivée de la loi Densité/Salinité [si loi Linéaire] [Def=0.7]
      0 = Masse de chaque Particule de Salinité (si particules)
      0 = Variation moy de Salinité entre 2 itérat. pour converg.
Transit = Régime Transport Salinité [0=Transitoire  1=Permanent]
      0 = Nombre maxi possible de Particules (MOC ou R.W.) [Def=30000]
      0 = Durée <==> Permanent si transport MOC ou R.W. en Perma [Def=0]
      0 = Coefficient de retard [-] Si pas ZNS [Def=1]
      0 = Temps de Demi-Dégradation (unité de temps) [Def=0]
      0 = Calcul de la Salinité (Concen_Dense) (Transport)
*** Initialisation avant calculs                    ***
  /POROSITE/SEMIS N: =35
  /SALINITE/SEMIS N: =0
  /SALINITE/MAILL C= 39:41 L=      1P=     11V=     30;
  /SALINITE/MAILL C= 38:41 L=      1P=     12V=     30;
  /SALINITE/MAILL C= 37:41 L=      1P=     13V=     30;
  /SALINITE/MAILL C= 36:41 L=      1P=     14V=     30;
  /SALINITE/MAILL C= 35:41 L=      1P=     15V=     30;
  /SALINITE/MAILL C= 34:41 L=      1P=     16V=     30;
  /SALINITE/MAILL C= 33:41 L=      1P=     17V=     30;
  /SALINITE/MAILL C= 31:41 L=      1P=     18V=     30;
  /SALINITE/MAILL C= 29:41 L=      1P=     19V=     30;
  /SALINITE/MAILL C= 26:41 L=      1P=     20V=     30;
  /CHARGE  /SEMIS N: =0
  /DEBIT   /MAILL C=      1L=      1P=      *V=     33;
  /DEBIT   /MAILL C=     41L=      1P=      *V=   9999;
  /*****/***** Fin d'Initialisation
```

6.8.4. Résultats de la modélisation

Le calcul s'effectue instantanément. À titre de contrôle, on peut demander l'édition du champ de masse volumique calculé (non représenté ici). La masse volumique calculée par la relation de Schlumberger, correspondant à la salinité de 30 kg/m^3, est égale à 1020.72 kg/m^3.

7. Conclusion

La prise en compte des variations spatiales et temporelles de la densité du fluide est nécessaire pour modéliser les aquifères situés à proximité de la mer, les aquifères profonds contenant de l'eau salée fossile, ou les aquifères pollués par infiltration de saumures. Dans ce but la prise en compte de la densité a été introduite dans le modèle hydrodynamique MARTHE. La salinité, dont résulte la densité du fluide, peut être imposée ou bien calculée par le modèle à partir de l'équation de transport (en régime permanent ou en régime transitoire).

Les calculs hydrodynamiques, 2D ou 3D, peuvent s'effectuer en charge ou en pression, en régime permanent ou en régime transitoire, en nappe libre ou captive, ou en Zone Non Saturée.

Un certain nombre d'applications décrites en détail permettront d'une part à aider les utilisateurs dans la mise en œuvre de la modélisation, et d'autre part à vérifier que le modèle fonctionne correctement.

Remerciements : Nous tenons à remercier M.L. Noyer pour sa relecture minutieuse du manuscrit de ce rapport et pour ses propositions d'amélioration.

8. Index des termes

9. Bibliographie

Bear J. (1979) - Hydraulics of Groundwater. *Mac Graw Hill* - New York.

Chiarelli A. (1973) - Étude des nappes aquifères profondes . Contribution de l'hydrogéologie à la connaissance d'un bassin sédimentaire et à l'exploration pétrolière. *Thèse Sc. Nat. Bordeaux*. 187 [64]p.

Elder J. W. (1967) - Transient convection in a porous medium. *J. Fluid Mech*., 27 (3), 609-623.

Frind E. O. (1982) - Simulation of long-term transient density dependent transport in groundwater. *Adv. Water Resources*, vol. 5 pp 73-97.

Galeati G., Gambolati G., Neuman S. P. (1992) - Coupled and partially coupled Eulerian-Lagrangian model of freshwater-seawater mixing. *Water Resour. Res*., vol. 28 n° 1 pp 149-165.

Henry H. R. (1962) - Transitory movements of the saltwater front in an extensive artesian aquifer. Effects of dispersion on salt encroachment in coastal aquifers. *U.S. Geol. Surv. Prof. Pap.*, 450-B, B87-B88.

Henry H. R. (1964) - Effects of dispersion on salt encroachment in coastal aquifers. *U.S. Geol. Surv. Water Supply Pap*., 1613-C, pp. C71-C84.

Herbert A. W., Jackson C. P., Lever D. A. (1988) - Coupled Groundwater Flow and Solute Transport with Fluid Density strongly dependent upon Concentration. *Water Resour. Res*., vol. 24, 2, 1781-1795.

Marsily G. de (1986) - Quantitative Hydrogeology. Groundwater hydrology for engineers. *Academic press Inc.* London.

Oldenburg C., Pruess K. (1995) - Dispersive transport dynamics in a strongly coupled groundwater-brine flow system. *Water Resources Res.*, Vol. 31 n° 2 pp 289-302.

Pinder G. F., Cooper H. H. (1970) - A numerical technique for calculating the transient position of the saltwater front. *Water Resources Res.*, Vol. 6 n° 3 pp 875-882.

Thiéry D. (1990) - MARTHE. Modélisation d'Aquifères par maillage Rectangulaire en régime Transitoire pour le calcul Hydrodynamique des Ecoulements. Version 4.3. *Rapport BRGM* 4S/EAU n° R32210.

Thiéry D. (1993a) - Résolution matricielle et nouvelles géométries dans le logiciel MARTHE. *Rapport BRGM* 4S/EAU n° R37762.

Thiéry D. (1993b) - Modélisation des aquifères complexes - Prise en compte de la zone non saturée et de la salinité. Calcul des intervalles de confiance. *Revue Hydrogéologie*, 1993, n° 4 pp. 325-336.

Thiéry D. (1994) - Modélisation 3D des écoulements en Zone Non Saturée avec le logiciel MARTHE. Version 5.4, *Rapport BRGM* n° R38108 HYT/DR 94

Thiéry D. (1995a) - Modélisation 3D du Transport de masse avec le logiciel MARTHE. Version 5.4, *Rapport BRGM* n° R38149 HYT/DR 95

Thiéry D. (1995b) - Modélisation des écoulements avec interactions chimiques avec le logiciel MARTHE. Version 5.5, *Rapport BRGM* n° R38463 HYT/DR 95

Thiéry D., Golaz C., Azaroual M. (2002) - Mise en oeuvre et tests d'application du code MARTHE – PHREEQC Version 6.2, *Rapport BRGM*/RP-51905-FR. 67 pp.

Thiéry D., Golaz C. (2002) - Consideration of vegetation effects in version 6.2 of the MARTHE model. Consequences for water and mass uptake. *Rapport BRGM*/RP-51988-FR. 48 pp.

Thiéry D. (2004) - Modélisation 3D du transport de masse avec double porosité. Logiciel MARTHE – version 6.4. *Rapp. BRGM*/RP-52811-FR. 39 pp.

Thiéry D. (2005) - Saltwater intrusion modelling with an efficient multiphase approach: Theory and several field applications. In: Groundwater and saline intrusion. 18 SWIM Carthagena 2004. Eds. L. Araguas, E. Custodio and M. Manzano, ISBN 84-7840-588-7, pp. 97-110.

Vandenbeusch M. (1976) - Essai et mise en production des aquifères profonds. Rapport n° 2. Correction de salinité, pression et température sur les mesures piézométriques. *Rapport BRGM* 76 SGN 482 AME.



Centre scientifique et technique
Service EAU
3, avenue Claude-Guillemin
BP 36009 – 45060 Orléans Cedex 2 – France – Tél. : 02 38 64 34 34